

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ БОРА И ФОСФОРА В КРЕМНИИ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Александров Л. Н., Бондарева Т. В., Качурин Г. А.,
Тысченко И. Е.

Проведено моделирование на ЭВМ ускоренной диффузии примесей, имплантируемых в кремний при высокой температуре. Диффузионные уравнения решались методом конечных разностей (считалось, что ускорение диффузии обусловлено избыточными точечными дефектами и пропорционально изменению их концентрации с глубиной). Расчетные профили сопоставлены с экспериментальными, полученными в результате имплантации при 900 °С ионов бора и фосфора набором доз в интервале $3 \cdot 10^{13} \div 10^{16} \text{ см}^{-2}$. Показано, что после внедрения ионов фосфора профили легирования хорошо согласуются с расчетами при значении диффузионной длины точечных дефектов $L_d = 0.5 \text{ мкм}$. При внедрении бора для достижения соответствия во всем интервале доз величину L_d необходимо уменьшать по мере приближения к области торможения ионов. Это объясняется тем, что проникающие вглубь атомы бора становятся стоками для точечных дефектов, сокращая диффузионную длину последних.

Известно, что радиационное воздействие на нагретые твердые тела ускоряет диффузионные процессы. До сих пор радиационно-ускоренная диффузия (РУД) примесей в кремнии изучалась и анализировалась преимущественно для случая, когда легирующие атомы введены заранее, а их разгонка ускоряется облучением легкими частицами [1-4]. Считается, что ускорение обусловлено генерацией пучком избыточных точечных дефектов и пропорционально их концентрации [4]. Имеющиеся решения диффузионных задач относятся к случаю диффузии из слоя с заданной концентрацией примеси. Обычно в них решается диффузионное уравнение для дефектов, распределение которых задает координатную зависимость коэффициента диффузии, и затем находится выражение для профилей концентрации примеси. Полученное в [1] решение уравнения диффузии позволило понять характер изменения примесного профиля, однако оно не учитывало конкретных начальных и граничных условий, возникающих в разных задачах. Например, оно не отвечает условиям внедрения легирующих ионов в нагретые до высоких температур подложки. Подобная ситуация возникает при сильноточной имплантации, легировании в процессе МЛЭ, ионном синтезе. Решение диффузионной задачи с переменным коэффициентом диффузии и с потоком через границу раздела, т. е. для $D \frac{\partial N}{\partial x} \Big|_{(0, t)} = j$, ранее не проводилось.

В настоящей работе представлены результаты численного решения диффузионного уравнения с уменьшающимся по глубине коэффициентом диффузии и сравнение результатов расчета с экспериментальными данными РУД бора и фосфора при высокотемпературной (900 °С) ионной имплантации. Решалось уравнение

$$\partial N(x, t) / \partial t = \text{div} (D(x) \text{grad} N(x, t)) + G(x), \quad (1)$$

где $N(x, t)$ — концентрация примеси, x — пространственная координата, t — время, $D(x)$ — коэффициент диффузии. Функция генерации имплантируемых ионов $G(x)$ описывается гауссианой, которая для относительно малых

энергий ионов при переходе к разностной форме может быть аппроксимирована как

$$\frac{J_0}{h_0} \delta(x-h_0), \quad \text{где } 0 \leq x \leq h_0.$$

Здесь J_0 — плотность потока ионов, h_0 — величина шага по x . Уравнение (1) решалось при следующих начальном и граничном условиях:

$$N(x, 0) = 0, \quad N(\infty, t) = 0, \quad (\partial N(x, t) / \partial x)_{x=0} = 0. \quad (2)$$

Из возможных изменений коэффициента диффузии с глубиной была выбрана зависимость, согласующаяся с обычно наблюдаемым распределением радиационных дефектов [1],

$$D(x) = D_0 \exp(-x/L_d). \quad (3)$$

Здесь D_0 — начальное значение коэффициента диффузии; L_d — диффузионная длина дефектов, которая в первом приближении может считаться постоянной.

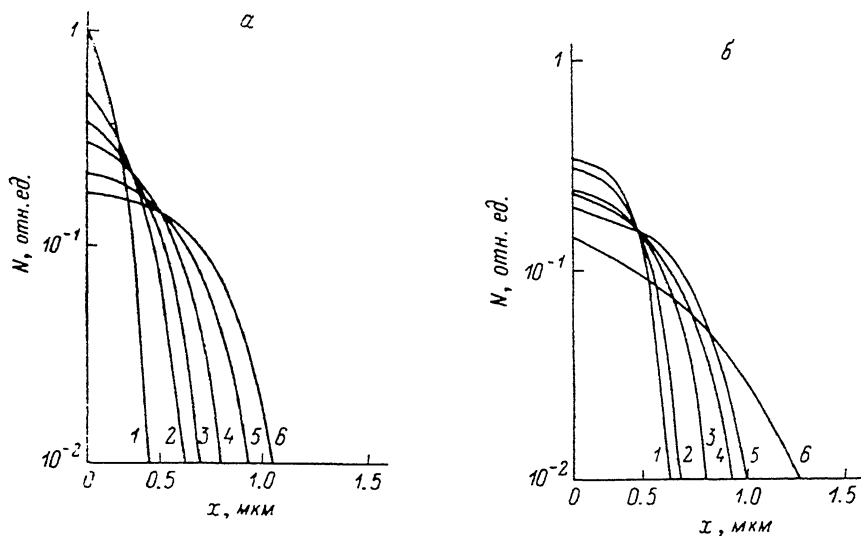


Рис. 1. Расчетные профили распределения примеси при фиксированной дозе.

а) $L_d = 0.2$ мкм; $D_0 \cdot 10^{-11}$ см²/с: 1 — 0.1, 2 — 0.5, 3 — 0.8, 4 — 1.0, 5 — 3.0, 6 — 5.0; б) $D_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ см²/с; L_d , мкм: 1 — 0.05, 2 — 0.08, 3 — 0.1, 4 — 0.15, 5 — 0.2, 6 — 0.5.

Решено уравнение (1) методом конечных разностей на ЭВМ. Использовался метод прогонки с выбранной симметричной неявной схемой с четырехточечным шаблоном второго порядка по пространству, первого порядка по времени [6]. Метод характеризуется сравнительно высокой экономичностью и точностью решения не хуже 1%. Шаги по времени — 0.1 с, по пространству — 0.1 мкм, рассматриваемая глубина диффузии 3 мкм (при толщине пластины 400 мкм). Параметрами в расчете были диффузионная длина дефектов L_d и D_0 . Критерием правильности выбора параметров явилось соответствие расчетных и экспериментальных кривых. В эксперименте ионы V^+ и P^+ внедрялись соответственно в n - и p -Si с энергиями 45 (V^+) и 100 кэВ (P^+) при плотности ионного тока $j_0 = 1$ мкА/см² и температуре мишени $T_i = 900$ °C в интервале доз ($3 \cdot 10^{13} \div 10^{16}$) см⁻². Профили легирования были получены дифференцированием данных послыстных холловских измерений [6].

При построении расчетных профилей считалось, что поступающая в кремний примесь диффундирует из слоя у поверхности. Там же происходит и генерация точечных дефектов, концентрация которых убывает с глубиной.

Для таких условий на рис. 1, а и б в отн. ед. (N) представлены расчетные профили распределения примеси, показывающие, как меняются их ширина и форма при изменении L_d и D_0 . Кривые правильно отражают ожидаемую тен-

денцию к переходу от пологих профилей к крутообрывающимся с уменьшением L_d при $D_0 = \text{const}$ и с увеличением D_0 при $L_d = \text{const}$.

На рис. 2 сопоставлены расчетные и экспериментальные профили для случая внедрения ионов фосфора. Для всех четырех исследованных доз экспериментальные профили хорошо описываются одной парой параметров $L_d = 0.5$ мкм и $D_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ см²/с. Указанная величина L_d характерна для нелегированного Si, а D_0 превышает коэффициент обычной диффузии фосфора при 900 °С примерно на 4 порядка. Диффузия фосфора в очень больших концентрациях имеет свои

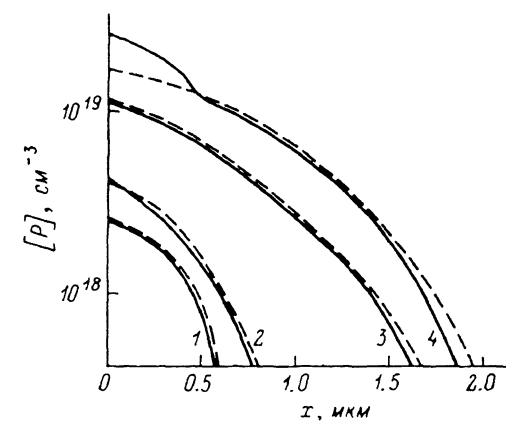


Рис. 2. Экспериментальные (сплошные линии) и расчетные (штриховые) распределения фосфора.

$D_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ см²/с, $L_d = 0.5$ мкм. Доза, см⁻²: 1 — 10^{14} , 2 — $3 \cdot 10^{14}$, 3 — 10^{15} , 4 — 10^{16}

особенности, проявляющиеся в возникновении характерных перегибов (рис. 2, кривая 4). Причины их появления обсуждены в [7] и лежат за рамками рассматриваемого нами вопроса.

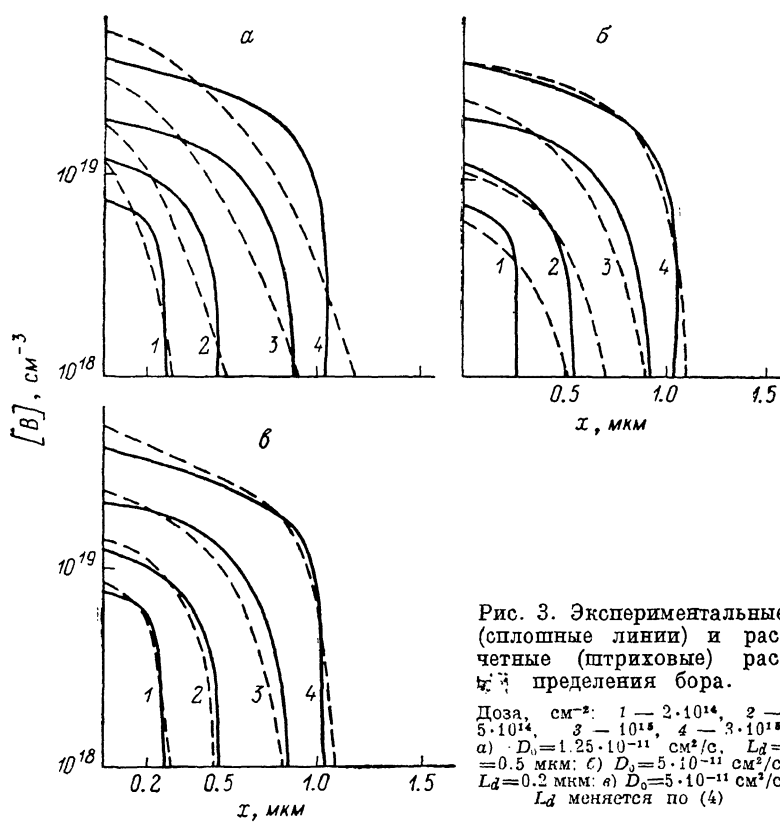


Рис. 3. Экспериментальные (сплошные линии) и расчетные (штриховые) распределения бора.

Доза, см⁻²: 1 — $2 \cdot 10^{14}$, 2 — $5 \cdot 10^{14}$, 3 — 10^{15} , 4 — $3 \cdot 10^{15}$. а) $D_0 = 1.25 \cdot 10^{-11}$ см²/с, $L_d = 0.5$ мкм; б) $D_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ см²/с, $L_d = 0.2$ мкм; в) $D_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ см²/с, L_d меняется по (4)

Поскольку механизм РУД для бора и фосфора предполагается одинаковым, численная модель должна дать согласие и с экспериментальными данными по диффузии бора. Единственное, что надо, по-видимому, учесть, — объемная плотность упругих потерь (генерация точечных дефектов) у ионов бора в 4 раза ниже. На рис. 3, а показаны экспериментальные профили распределения

бора и соответствующие расчетные кривые, для которых сохранено $L_d = 0.5$ мкм, а D_0 по сравнению с расчетами рис. 2 уменьшено в 4 раза. Видно, что сокращение ширины профилей согласуется с экспериментом, однако форма вычисленных и экспериментальных профилей разная.

Варьирование величинами L_d и D_0 показало, что для достижения лучшего согласия необходимо прежде всего уменьшать L_d . Сравнение опытных данных с численным моделированием при $L_d = 0.2$ мкм и $D_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ см² приведено на рис. 3, б. Формы расчетных профилей лучше соответствуют экспериментальным, близки и глубины провонкивания примеси. Вместе с тем из рис. 3, б следует, что по мере приближения к области торможения ионов бора расхождение увеличивается (рис. 3, б, кривые 1 и 2). Очевидно, в случае бора простой экспоненциальный спад концентрации точечных дефектов с глубиной следует заменить функцией, которая меняет L_d от больших значений в глубине кристалла ($L_d, \infty = 0.5$ мкм) до существенно меньших при приближении к поверхности. Из общих соображений нами была выбрана полугауссиана, описывающая распределение примеси по глубине. Поэтому

$$L_d(x) = L_{d, \infty} [1 - \exp(-x/L_d^*)^2], \quad (4)$$

где $L_d^* = 1.5$ мкм подбиралась опытным путем. Как видно из рис. 3, в, использование предложенной зависимости $L_d(x)$ позволяет добиться хорошего соответствия расчетов с экспериментами во всем изученном диапазоне доз бора.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что примененная схема позволяет моделировать диффузионные профили при высокой температуре имплантации ионов в широком интервале доз. Наряду с этим моделирование дало возможность выявить ряд интересных деталей РУД. В частности, увеличение плотности упругих потерь при переходе от легких ионов бора к более тяжелым ионам фосфора не приводит к адекватному увеличению D_0 , связанному с концентрацией избыточных подвижных дефектов. Это означает, что с ростом темпа генерации точечных дефектов падает время их жизни. С другой стороны, внедрение ионов бора сокращает величину L_d в приповерхностной области. Поскольку упругие потери ионов бора ниже, чем у фосфора, эффект должен иметь примесную природу. Ранее во многих работах отмечалось, что бор является эффективным стоком для подвижных точечных дефектов [8-10]. Мы полагаем, что именно это и явилось причиной уменьшения величины L_d .

Авторы признательны А. П. Мажирину за имплантацию ионов фосфора, А. П. Минакову за помощь при проведении холловских измерений и В. И. Кольдеву за полезное обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Minear R. I., Nelson D. G., Gibbons J. F. // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. N 8. P. 3468—3480.
- [2] Fair R. B. // J. Appl. Phys. 1980. V. 51. N 11. P. 5828—5832.
- [3] Maby R. G. // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. N 3. P. 830—836.
- [4] Dienes G. J., Damask A. C. // J. Appl. Phys. 1958. V. 29. N 12. P. 1713—1721.
- [5] Самарский А. А. Введение в численные методы. М., 1987. 352 с.
- [6] Качурин Г. А., Тыщенко И. Е., Фельсков М. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 7. С. 1193—1197.
- [7] Fair R. B. // Materials processing theory and practices / Ed. by F. F. Y. Wang. Amsterdam, 1981. P. 315—442.
- [8] Kasaka Y. A., Horie K., Wonedo K., Sakurai T., Nishi H., Kawabe S., Tohi A. // J. Appl. Phys. 1973. V. 44. N 1. P. 220—224.
- [9] Pelous G. P., Lecrosnier D. P., Нерос Р. // Ion Implantation in Semiconductors / Ed. by S. Namba. N. Y., 1975. P. 439—448.
- [10] Аброян И. А., Беляков В. С., Кондратьев Н. А., Ковышев В. В., Крысов Г. А., Никулина Л. М., Тютюва А. И., Тетрова Г. М. // ФТП. 1981. Т. 15. В. 4. С. 741—745.