

## Перераспределение эрбия при кристаллизации скрытых аморфных слоев кремния

© О.В. Александров, Ю.А. Николаев, Н.А. Соболев, В.И. Сахаров, И.Т. Серенков, Ю.А. Кудрявцев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 17 декабря 1998 г. Принята к печати 17 декабря 1998 г.)

Исследовалось перераспределение Er при его имплантации в кремний с дозами вблизи порога аморфизации и последующей твердофазной эпитаксиальной кристаллизации. При дозах  $Er\ 5 \cdot 10^{13}$  и  $1 \cdot 10^{14}\text{ см}^{-2}$  методом резерфордовского обратного рассеяния обнаружено образование скрытого аморфного  $\alpha$ -слоя. Сегрегационное перераспределение Er в этом случае происходит навстречу с двух сторон, соответствующих верхней и нижней границам скрытого  $\alpha$ -слоя, и приводит к образованию концентрационного пика в месте встречи двух фронтов кристаллизации. Предложен метод расчета координатной зависимости коэффициента сегрегации  $k$ , исходя из профилей распределения примеси эрбия до и после отжига. На зависимости  $k(x)$  обнаружен участок спада, протяженность которого увеличивается с уменьшением дозы имплантации Er. Его появление объясняется неравновесностью сегрегации в начале твердофазной эпитаксиальной кристаллизации.

В слоях кремния, имплантированных ионами редкоземельного элемента эрбия с дозами, превышающими порог аморфизации, наблюдается значительное изменение концентрации профилей в процессе отжига при температурах  $600\text{--}850^\circ\text{C}$ , когда коэффициенты диффузии Er как в аморфной, так и в монокристаллической фазах пренебрежимо малы [1–4]. Эти изменения обусловлены сегрегацией примеси на движущейся в процессе твердофазной эпитаксиальной (ТФЭ) кристаллизации границе аморфный ( $\alpha$ ) слой–монокристаллическая ( $c$ ) подложка. Характер перераспределения Er зависит от условий имплантации: температуры мишени, энергии и дозы внедрения, дополнительной имплантации примеси кислорода [3,4]. Концентрационные профили Er после ТФЭ кристаллизации приповерхностного  $\alpha$ -слоя кремния описываются количественной моделью [5], параметрами которой являются ширина переходного слоя и коэффициент сегрегации, зависящий от координаты. При определенных условиях имплантации аморфный слой может оказаться скрытым, отделенным от поверхности прослойкой неаморфизованного монокристаллического кремния. Такие условия реализуются, например, в технологии создания структур SIMOX для микроэлектроники [6] при имплантации ионов кислорода с достаточно большими энергиями ( $E > 200\text{ кэВ}$ ) и дозами ( $D \approx 1 \cdot 10^{18}\text{ см}^{-2}$ ). Образование скрытого  $\alpha$ -слоя наблюдалось и при имплантации ионов Er ( $E = 0.5\text{ МэВ}$ ,  $D = 1 \cdot 10^{15}\text{ см}^{-2}$ ) в  $\langle 100 \rangle$  Si при температуре мишени  $200^\circ\text{C}$  [3]. Перераспределение Er при последующем быстром термическом отжиге в этом случае значительно отличалось от случая имплантации при температуре  $20^\circ\text{C}$  с  $\alpha$ -слоем, выходящим на поверхность.

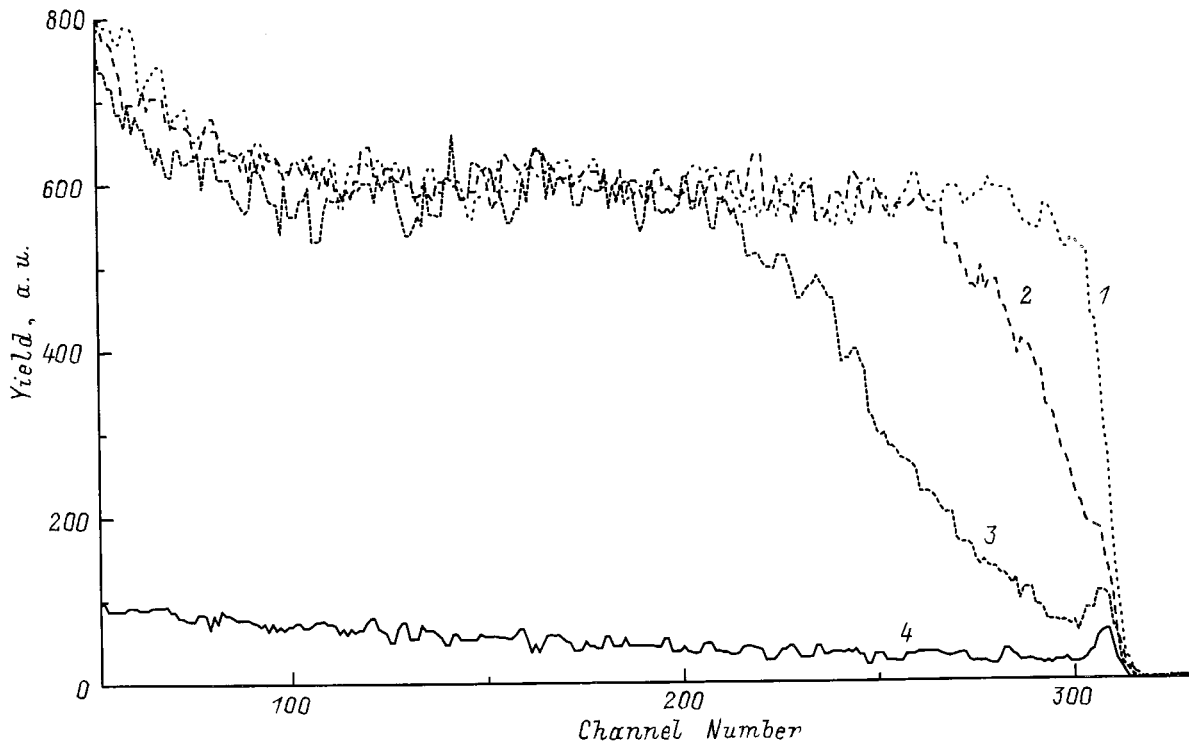
Целью настоящей работы является исследование особенностей сегрегационного перераспределения Er при ТФЭ кристаллизации скрытых слоев кремния, аморфизованных ионной имплантацией.

Имплантация ионов Er проводилась при комнатной температуре с энергиями 1.0, 1.2 и 2 МэВ и дозами вбли-

зи порога аморфизации в диапазоне  $1 \cdot 10^{13}\text{--}1 \cdot 10^{14}\text{ см}^{-2}$  на установке High Voltage Engineering Europe K2MV в подложки монокристаллического кремния  $p$ -типа проводимости, выращенного методом Чохральского с удельным сопротивлением  $1\text{ Ом} \cdot \text{см}$  и ориентацией  $\langle 100 \rangle$ . Некоторые образцы имплантировались также ионами кислорода на глубину, соответствующую пробегу ионов Er, с дозой, в 10 раз превышающей дозу Er. После имплантации проводились отжиги при температуре  $620^\circ\text{C}$  в течение 1 ч в хлорсодержащей атмосфере. Профили концентрации Er по глубине определялись методом вторичной ионной масс-спектропии на установке Cameca IMS 4f. Появление  $\alpha$ -слоя, его толщина и расположение определялись методом обратного резерфордовского рассеяния протонов с энергией 230 кэВ.

При малых дозах имплантации ионов Er вплоть до дозы  $D = 3 \cdot 10^{13}\text{ см}^{-2}$  в спектрах обратного рассеяния канализованных ионов отсутствует сигнал аморфной фазы. При дозах  $Er\ 5 \cdot 10^{13}\text{--}1 \cdot 10^{14}\text{ см}^{-2}$  наблюдается появление аморфной фазы при сохранении поверхностного слоя монокристаллическим (рис. 1, кривые 2 и 3). При дозах, начиная с  $4 \cdot 10^{14}\text{ см}^{-2}$ , монокристаллический слой вблизи поверхности исчезает,  $\alpha$ -слой становится сплошным.

При малых дозах имплантации  $D = (1\text{--}3) \cdot 10^{13}\text{ см}^{-2}$  профили распределения Er после отжигов практически не отличаются от исходных. Заметное отличие появляется при дозе  $5 \cdot 10^{13}\text{ см}^{-2}$ , что соответствует ожидаемой критической дозе аморфизации кремния для ионов Er с массой 168 [7]. При дозах  $5 \cdot 10^{13}$  и  $1 \cdot 10^{14}\text{ см}^{-2}$  сегрегационное перераспределение Er начинается с двух сторон, расположенных несимметрично относительно максимума распределения примеси при  $x = R_p$ , где  $R_p$  — средний просцированный пробег ( $R_p = 0.4\text{ мкм}$  при  $E = 1.2\text{ МэВ}$ ) (рис. 2, кривая 2). Оно направлено в глубь скрытого  $\alpha$ -слоя и приводит к образованию концентрационного пика в месте встречи двух фронтов кристаллизации. При совместной имплантации с кисло-



**Рис. 1.** Энергетические спектры обратного резерфордского рассеяния: случайный (1); каналированный вдоль оси  $\langle 100 \rangle$  после имплантации ионов Er с  $D = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  (2) и  $D = 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  (3) и каналированный вдоль оси  $\langle 100 \rangle$  для исходного монокристаллического кремния (4).

родом перераспределение Er выражено заметно меньше, а положение сегрегационного пика концентрации смещается в сторону максимума концентраций Er и O (рис. 2, кривая 3). При увеличении дозы Er до  $4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , по данным [4], примесь эрбия перемещается только в направлении к поверхности, что свидетельствует о выходе  $\alpha$ -слоя на поверхность.

При дозах имплантации  $5 \cdot 10^{13}$  и  $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  сегрегационный пик Er располагается на расстоянии  $\sim 0.7R_p$ . Это объясняется расположением середины скрытого  $\alpha$ -слоя на расстоянии  $\sim (0.75-0.8)R_p$  от поверхности в соответствии с распределением максимума потерь и соответственно радиационных нарушений для тяжелых ионов [8]. Дополнительная имплантация ионов кислорода приводит к смещению сегрегационного пика до расстояния  $(0.8-0.85)R_p$  в сторону максимума концентрации Er и O. Этот результат можно связать с уменьшением скорости кристаллизации  $\alpha$ -Si под влиянием электрически неактивной примеси кислорода [9,10]. Отметим, что в работе [2] положение сегрегационного пика практически совпадало с серединой скрытого  $\alpha$ -слоя и с максимумом исходного распределения Er ( $R_p = 0.16 \text{ мкм}$  при  $E = 0.5 \text{ МэВ}$ ), что, вероятно, связано со спецификой распределения радиационных дефектов в нагретой мишени.

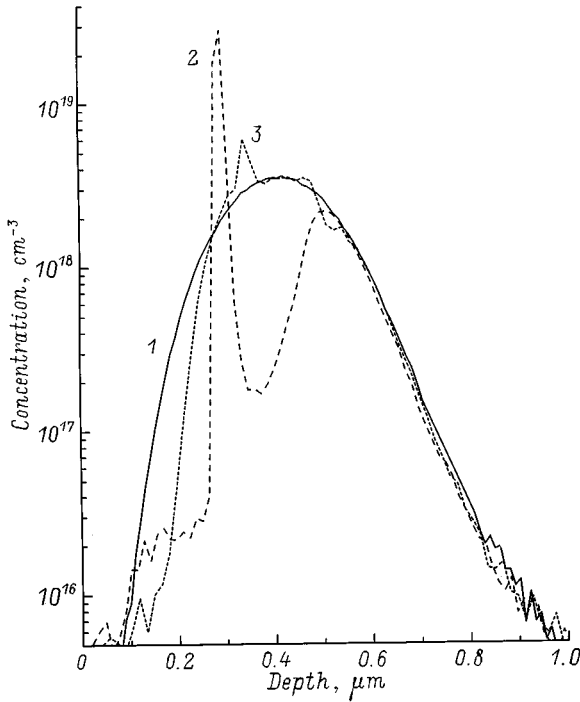
Таким образом, при отжиге структур со скрытым  $\alpha$ -слоем ТФЭ кристаллизация происходит не только на нижней  $\alpha/c$ -границе с монокристаллической подлож-

кой в направлении к поверхности, но и на верхней  $\alpha/c$ -границе с приповерхностным неаморфизованным монокристаллическим слоем в направлении в глубь подложки. В связи с этим в количественную модель сегрегационного перераспределения Er [5], разработанную нами для приповерхностного аморфного слоя, необходимо ввести второй фронт кристаллизации, перемещающийся вглубь. В этом случае смена зонной кристаллизации на направленную происходит при приближении верхнего (1) и нижнего (2) фронтов кристаллизации друг к другу на расстояние  $b = L_1 + L_2$ , где  $L_1$  и  $L_2$  — ширины соответствующих переходных слоев. При постоянных  $L_1$  и  $L_2$  решалась обратная задача нахождения коэффициента сегрегации  $k(x)$  по концентрационным профилям Er в имплантированном слое до и после сегрегационного перераспределения.

Для зонной кристаллизации, пока  $b \geq L_1 + L_2$ , коэффициент сегрегации может быть найден интегрированием уравнения (1) модели [5]

$$\frac{dC_a}{dy} = \frac{C_0(y) - kC_a(y)}{L}, \quad (1)$$

где  $y$  — текущая толщина зонно-кристаллизующего слоя, отсчитываемая от начальной  $\alpha/c$ -границы,  $C_0(y)$  — начальное распределение примеси в аморфном слое до отжига,  $C_a(y)$  — текущая концентрация примеси в переходном  $\alpha$ -слое ширины  $L$  ( $L_1$  или  $L_2$ ). После



**Рис. 2.** Концентрационные профили Er в Si(100) после имплантации ионов Er<sup>+</sup> ( $E = 1.2$  МэВ,  $D = 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>) (1, 2) и ионов O<sup>+</sup> ( $E = 0.17$  МэВ,  $D = 1 \cdot 10^{15}$  см<sup>-2</sup>) (3) до (1) и после (2, 3) отжига.

интегрирования (1) с учетом равенства

$$C(y) = kC_a(y), \tag{2}$$

где  $C(y)$  — концентрация примеси в перекристаллизованном слое после отжига, и условия  $k = 1$  при  $C(y) = C_0(y)$  получаем

$$k(y) = \frac{LC(y)}{Q_0(y+L) - Q(y)}, \tag{3}$$

где  $Q_0(y+L)$  и  $Q(y)$  — количество примеси в слоях толщиной  $y+L$  и  $y$  соответственно до и после кристаллизации.

Для направленной кристаллизации при  $b \leq L_1 + L_2$  коэффициент сегрегации может быть найден из уравнения (3) модели [5]

$$\frac{dC_a(z)}{dz} = (1-k) \frac{C_a(z)}{L-z}, \tag{4}$$

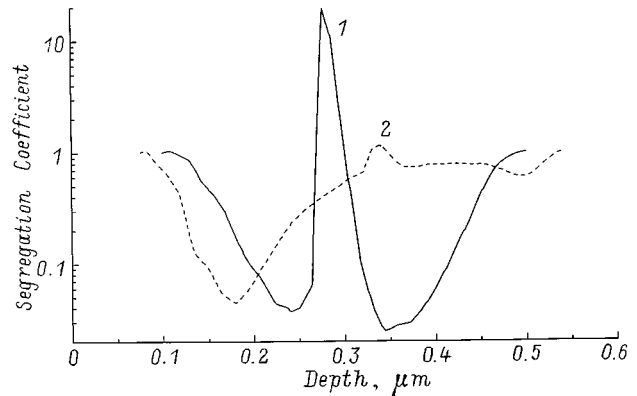
где  $z$  — текущая толщина направленно-кристаллизующего слоя, отсчитываемая от  $x_p - L_1$  или  $x_p + L_2$ , где  $x_p$  — точка встречи фронтов 1 и 2. С учетом равенства  $C(z) = kC_a(z)$ , представляя производную в конечно-разностной форме, получаем

$$k(z) = \frac{L-z-\Delta z}{\frac{(L-z)}{k(z-\Delta z)} \frac{C(z-\Delta z)}{C(z)} - \Delta z}, \tag{5}$$

где  $\Delta z$  — приращение по  $z$ .

С помощью выражений (3) и (5) были рассчитаны зависимости коэффициентов сегрегации от глубины для профилей Er, представленных на рис. 2. Значения ширин переходных областей брались из работы [4]:  $L_1 = L_2 \approx 50$  нм при имплантации только ионов Er ( $E = 1$  МэВ) и  $L_1 = L_2 \approx 16$  нм при совместной имплантации ионов Er и O. Как видно из рис. 3, в начале процесса кристаллизации наблюдается падение величины коэффициента сегрегации от 1 до значений  $(2.5-5) \cdot 10^{-2}$ , которое затем сменяется ростом  $k$ , особенно быстро в области пиков концентраций эрбия. Более высокая концентрация кислорода в нижней части скрытого  $\alpha$ -слоя ослабляет уменьшение коэффициента сегрегации на начальной стадии ТФЭ кристаллизации и его увеличение на последующей стадии ТФЭ кристаллизации. Этот результат может быть связан с образованием комплексов Er-O и уменьшением скорости кристаллизации в присутствии высокой концентрации электрически неактивной примеси кислорода.

Особенностью концентрационного профиля Er при двусторонней ТФЭ кристаллизации с относительно малой дозой имплантации является относительно большое расстояние между точками максимума и минимума на изломе концентрационного профиля вблизи первоначальной нижней  $\alpha/c$ -границы (рис. 2, кривая 2). Это расстояние увеличивается с уменьшением дозы Er от 0.05 мкм при дозе  $D = 2 \cdot 10^{15}$  см<sup>-2</sup>, по данным [4], до 0.14 мкм при дозах  $D = 5 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>, по данным настоящей работы. На этом участке коэффициент сегрегации уменьшается от 1 до значения  $k_0$  в координатной зависимости  $k(x)$ , найденной в работе [5], и не описывается этой зависимостью. Такое поведение  $k(x)$  можно объяснить неравновесным характером сегрегации в начале процесса ТФЭ кристаллизации, когда происходит формирование переходного слоя с увеличенным коэффициентом диффузии. По-видимому, для менее дефектных  $\alpha$ -слоев, образующихся при малых дозах имплантации Er вблизи порога аморфизации ( $D \gtrsim D_\alpha$ ), этот процесс происходит



**Рис. 3.** Зависимости коэффициента сегрегации Er от глубины для профилей 2 (кривая 1) и 3 (кривая 2), приведенных на рис. 2.

медленнее, чем для более дефектных  $\alpha$ -слоев, формирующихся при больших дозах ( $D \gg D_\alpha$ ).

Таким образом, исследовано перераспределение Er при ТФЭ кристаллизации скрытых аморфных слоев кремния. Сегрегация при встречном движении фронтов кристаллизации приводит к смещению профилей распределения Er внутрь скрытого  $\alpha$ -слоя с образованием сегрегационного концентрационного пика вблизи его середины. Совместная имплантация с ионами кислорода уменьшает концентрацию эрбия в сегрегационном пике и смещает его к максимуму распределения Er и O. Предложен метод расчета зависимости коэффициента сегрегации от глубины. Спад на зависимости  $k(x)$  в начале ТФЭ кристаллизации объясняется неравновесным характером сегрегации на этом участке.

Авторы выражают благодарность Е.О. Паршину за проведение ионной имплантации.

Работа выполнена при частичной поддержке ISTC (грант 168) и INTAS–РФФИ (грант 95-0531).

## Список литературы

- [1] D. Mountonnet, H. L'Haridon, P.N. Favennec, M. Salvi, M. Gauneau, F.A. D'Avitaya, J. Chroboczek. *Mater. Sci. Eng. B*, **4**, 75 (1989).
- [2] W.P. Gillin, Z. Jingping, B.J. Sealy. *Sol. St. Commun.*, **77**, 907 (1991).
- [3] J.S. Custer, A. Polman, H.M. van Pinxteren. *J. Appl. Phys.*, **75**, 2809 (1994).
- [4] О.В. Александров, Ю.В. Николаев, Н.Н. Соболев. *ФТП*, **33**, 114 (1999).
- [5] О.В. Александров, Ю.В. Николаев, Н.Н. Соболев. *ФТП*, **32**, 1420 (1998).
- [6] M.A. Guerra. *Sol. St. Technol.*, **33**, 75 (1990).
- [7] V.M. Gusev, M.I. Guseva, C.V. Starinin. *Rad. Eff.*, **15**, 251 (1972).
- [8] X. Риссел, И. Руге. *Ионная имплантация* (М., Наука, 1983).
- [9] А.Ф. Вяткин. *Поверхность*, N 4, 5 (1991).
- [10] G.L. Olson, J.A. Roth. In: *Handbook of crystal growth*, ed. by D.T.J. Hurle (1994) v. 3, p. 257.

Редактор В.В. Чалдышев

## Erbium redistribution during crystallization of silicon buried amorphous layers

O.V. Aleksandrov, Yu.A. Nikolaev, N.A. Sobolev, V.I. Sakharov, I.T. Serenkov, Yu.A. Kudryavtsev

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The erbium redistribution during solid phase epitaxial (SPE) crystallization has been studied after the annealing of Si that was implanted at ion doses near amorphous threshold. Formation of buried amorphous layers was detected by Rutherford backscattering of protons at implantation doses  $5 \cdot 10^{13}$  and  $1 \cdot 10^{14}$  Er/cm<sup>2</sup>. The amorphous/crystalline interfaces move towards each other and the formation of erbium concentration peak takes place at their meeting. The calculation technique of coordinate dependence of segregation coefficient  $k$  was proposed using concentration profiles of erbium before and after annealing. Range of the drop of  $k(x)$  increases as Er implantation dose decreases. Its appearance is explained by a nonequilibrium segregation when SPE crystallization starts.

Fax: (812) 2471017 (Sobolev)

E-mail: Nick@Sobolev.ioffe.rssi.ru