

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ СУБМИКРОННОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

**Ф. Ф. Комаров¹, А. Ф. Комаров¹,
А. М. Миронов¹, Г. М. Заяц²,
В. А. Солодуха³, Ю. В. Макаревич¹,
С. А. Мискевич¹**

¹*НИИ прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко
Минск, Беларусь,
E-mail: komarovF@bsu.by*

²*Институт математики НАН Беларуси
Минск, Беларусь,
E-mail: zayats@im.bas-net.by*

³*ОАО «Интеграл»
Минск, Беларусь,
E-mail: sva@integral.by*

Разработан программный комплекс для моделирования процессов низкоэнергетической имплантации легирующих примесей в кремниевые структуры и постимплантационного быстрого термического отжига (БТО) этих структур. Проведен учет влияния на диффузию имплантированной примеси электрического поля, внутренних напряжений, связывания собственных междоузельных атомов кремния атомами углерода. Программное обеспечение интегрировано в среду программного комплекса ATHENA фирмы Silvaco Inc., что позволяет также проводить расчет электрофизических свойств субмикронных МОП-транзисторов.

Ключевые слова: ионная имплантация, кремний, диффузия, быстрый термический отжиг, моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Для создания субмикронных полупроводниковых приборов и интегральных микросхем необходимо введение примесей на небольшие глубины с использованием процессов ионной имплантации с малыми энергиями и БТО. Для получения сверхмелких $p-n$ переходов с требуемыми профилями концентрации атомов примеси и, следовательно, необходимыми вольтамперными характеристиками, необходимо определять оптимальные параметры ионной имплантации В, Р, As, Sb и последующего отжига. Нами разработан программный комплекс моделирования процессов ионной имплантации и постимплантационных термообработок для формирования мелких и сверхмелких легированных слоев элементной базы субмикронной электроники.

МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Физико-математическая модель ионной имплантации базируется на численном решении обратных кинетических уравнений Больцмана (определение пространственных моментов распределения имплантированной примеси в соответствующей среде). Обратное кинетическое уравнение описывает эволюцию функции $F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ распределения ионов по энергиям E и направлениям движения \mathbf{n} в точке \mathbf{r} . Для описания изменений функции распределения используется концепция сечений рассеяния. Если частица движется со скоростью $v = (2E/M_1)^{1/2}$, то вероятность рассеяния в состояние, соответствующее сечению $d\sigma$ за время δt , будет равно $Nv\delta t d\sigma$, где N — концентрация атомов мишени, которая может зависеть от \mathbf{r} . Интеграл рассеяния должен включать в рассмотрение как процессы, приводящие к удалению частиц из состояния $(E, \mathbf{n}, \mathbf{r})$, так и процессы, приводящие к пополнению данного состояния $(E, \mathbf{n}', \mathbf{r})$ за счет рассеяния [1]. Уравнение для функции распределения F получаем, учитывая баланс вероятностей до и после продвижения иона на некоторое достаточно короткое расстояние $\delta\mathbf{r}$ ($\delta\mathbf{r}$ параллельно \mathbf{n}). После прохождения ионом расстояния $\delta\mathbf{r}$ существует вероятность $f_n = N |\delta\mathbf{r}| d\sigma_n'$ для столкновения, характеризующегося переданной энергией T_n и появлением двух ионов: одного с энергией $(E - T_n)$ и углом \mathbf{n}' и другого (атома отдачи) с энергией T_n и углом \mathbf{n}'' . Кроме того, существует вероятность $f_e = N |\delta\mathbf{r}| d\sigma_e(T_e, E)$ того, что ион передает энергию электронам мишени.

Используя предположение о взаимной независимости процессов ядерного рассеяния и электронного торможения, обратное кинетическое уравнение можно записать в виде:

$$\begin{aligned} (\partial / \partial \mathbf{r})F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) = N \int d\sigma_n' [F(\mathbf{r}, \mathbf{n}', E - T_n) - F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) + F(\mathbf{r}, \mathbf{n}'', T_n)] + \\ + N \int d\sigma_e [F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E - T_e) - F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)], \end{aligned} \quad (1)$$

где $\partial/\partial\mathbf{r}$ — производная по направлению $\delta\mathbf{r}$.

Последний интеграл в (1), описывающий вклад неупругого торможения, можно упростить. Учитывая, что масса электрона намного меньше массы налетающего иона и передаваемая электрону в одном столкновении энергия T_e намного меньше E , разложим подынтегральное выражение в ряд по T_e :

$$I_e(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) = N \int d\sigma_e [F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E - T_e) - F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)] = \\ = -NS_e \frac{\partial F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)}{\partial E} + \frac{1}{2} N\Omega_e^2(E) \frac{\partial^2 F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)}{\partial E^2},$$

где $S_e(E) = \int T_e d\sigma_e$ — полное сечение неупругого торможения; $\Omega_e^2(E) = \int T_e^2 d\sigma_e$ — страгглинг электронного торможения. Вывод транспортного уравнения (1) приведен в работе [1].

Численное решение уравнения (1) позволило получить пространственные моменты распределения ионов бора, фосфора, мышьяка, сурьмы, BF_2 и углерода при имплантации с энергиями от 500 эВ до 1 МэВ в материалы, применяемые в современной кремниевой технологии изготовления интегральных схем. Полученные пространственные моменты распределения имплантированной примеси используются для расчета концентрационных профилей распределения имплантированных примесей. Для построения двумерных распределений примесей в многослойных непланарных структурах применяются методы построения профилей, изложенные в [2, 3].

МОДЕЛЬ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСЕЙ В КРЕМНИИ

Примененные модели процесса БТО кремниевых пластин представлены в наших работах [4–7]. Миграция атомов примеси рассматривается в составе диффундирующих комплексов вида «атом примеси – дефект кремниевой структуры». Учитывается влияние неравновесных концентраций дефектов, внутренних упругих напряжений, кластеризации примесей, электрического поля и поверхностных явлений на эволюцию распределений атомов примесей в двумерной области моделирования. Разработанная нами модель также учитывает влияние атомов углерода на диффузию имплантированных атомов бора и фосфора в кремнии [8].

Моделирование процесса диффузии примесей в кремнии в общем виде осуществляется на основании численного решения уравнения (2).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \sum_{i=1}^p \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D^E(C) \frac{\partial (C^V C)}{\partial x_i} + D^F(C) \frac{\partial (C^I C)}{\partial x_i} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial x_i} \right), \quad (2)$$

Здесь $p = 1, 2, 3$; $D^N = C(D^E C^V + D^F C^I) / \sqrt{(C - N)^2 + 4n_e^2}$.

В (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; $D^E = D_i^E \frac{1 + \beta_1^E \chi + \beta_2^E \chi^2}{1 + \beta_1^E + \beta_2^E}$, D_i^E — собственный коэффициент диффузии атомов по указанному выше вакансионному механизму;

β_1^E и β_2^E — параметры, описывающие относительный вклад в процесс переноса примеси однократно и двукратно заряженных вакансий соответственно; D^F — эффективный коэффициент диффузии примеси в поле внутренних упругих напряжений по механизму образования комплексов с собственными межузельными атомами;

Уравнение (2) рассматриваем в одно-, дву- или трехмерной области G с границей Γ . Для уравнения (2) применяем граничные условия общего вида

$$\alpha_1 \left(D^E(C) \frac{\partial(C^V C)}{\partial \mathbf{n}} + D^F(C) \frac{\partial(C^I C)}{\partial \mathbf{n}} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \right) + \alpha_2 C = \alpha_3, \quad (3)$$

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 Γ имеют место условия отражения

$$D^E(C) \frac{\partial(C^V C)}{\partial \mathbf{n}} + D^F(C) \frac{\partial(C^I C)}{\partial \mathbf{n}} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = 0.$$

Начальные условия имеют вид

$$C(\mathbf{x}, t)|_{t=0} = C_0(\mathbf{x}), \quad (4)$$

где значения $C_0(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x} = x$ ($p = 1$), $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ ($p = 2$), $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ ($p = 3$)) 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 Γ 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 $C^{V,I}(\mathbf{x}, t)|_{t=0}$ могут быть рассчитаны при моделировании процесса ионной имплантации явно или согласно модели «+1» [9].

Численное решение нелинейной системы уравнений (2)–(6) основано на разностном методе [10].

В качестве примера на рис. 1 приведено отображение программой визуализации TonyPlot результата расчета с помощью разработанного нами программного комплекса распределения имплантированного фосфора в сложной структуре (фоторезист, оксид кремния, кремний) после имплантации P^+ (100 кэВ , $7 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) и отжига $1000 \text{ }^\circ\text{C}$, 30 с . Формирование структуры, определение области моделирования и отображение результатов выполнено средствами ATHENA.

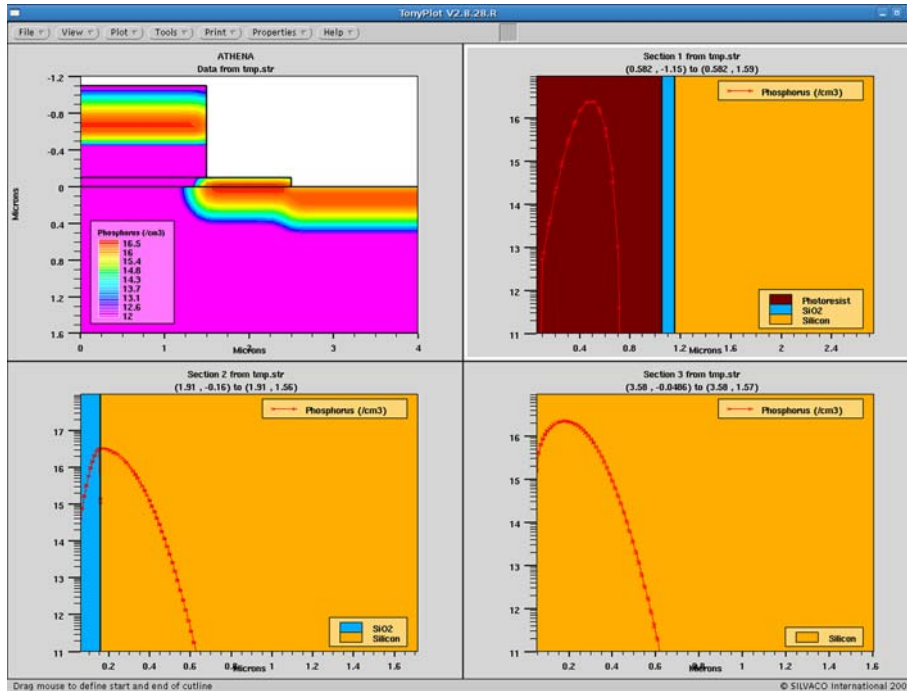


Рис. 1. Совместная работа с системой моделирования ATHENA

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные физико-математические модели и численные алгоритмы дают возможность моделировать технологические процессы низкоэнергетической ионной имплантации и быстрого термического отжига полупроводниковых структур, что позволяет получить легированные области глубиной менее 100 нм и заметно повысить плотность упаковки УБИС. Разработанный на основе этих моделей программный комплекс, интегрированный в систему 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 B , BF_2 , P , As , Sb , C в кремниевые структуры, соответствующие типичным сильно легированным мелким активным областям элементов УБИС, и последующего быстрого термического отжига. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными

данными, полученными методами вторичной ионной масс-спектропии, в том числе позволяют предсказывать экспериментально наблюдаемые аномальные явления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Буренков, А. Ф. Пространственные распределения энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений в твердых телах / А. Ф. Буренков, Ф. Ф. Комаров, М. А. Кумахов, М. М. Темкин. М.: Энергоатомиздат, 1985. 248 с.
2. Burenkov, A. F. Two-Dimensional Local Ion Implantation Distribution / A. F. Burenkov, A. G. Kurganov, G. G. Konoplyanik // Surface Sciences. 1989. Vol. 8. P. 52.
3. Parab, K. B. Analysis of Ultra-Shallow Doping Profiles Obtained by Low Energy Ion Implantation / K. B. Parab, D. H. Yang, S. J. Morris // J. Vac. Sci. Techn. B. 1996. № 1. Vol. 4. P. 260.
4. Komarov, F. F. Mechanisms of arsenic clustering in silicon / F. F. Komarov, O. I. Velichko, V. A. Dobrushkin, A. M. Mironov // Phys. Rev. 2006. B 74, 035205. P. 035205-1–035205-10.
5. Simulation of Rapid Thermal Annealing of Low-Energy Implanted Arsenic in Silicon / F. F. Komarov [et al] // Physics and Chemistry of Solid State, 2007, Vol. 8, № 3. P. 494–499.
6. Modelling of low-energy-implanted phosphorus diffusion during rapid thermal processing of the semiconductor structures / A. M. Mironov [et al] // Vacuum. 2009. Vol. 83. P. 127–130.
7. Numerical simulation of impurity diffusion at the formation of ultrashallow doped areas in semiconductors / F. F. Komarov [et al] // Journal of Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2010. Vol. 13, № 4. P. 389–395.
8. Комаров, Ф. Ф. Моделирование процесса быстрого отжига кремниевых структур, имплантированных бором и бором с углеродом / Ф. Ф. Комаров, А. Ф. Комаров, А. М. Миронов, Г. М. Заяц // Автоматизация проектирования дискретных систем (CAD DD'10): Матер. VII Междунар. конф. 2010 г. 16–17 ноября. Минск, Беларусь. С. 370–376.
9. Griffin, P. B. Doping and damage dose dependence of implant induced transient enhanced diffusion below the amorphization threshold / P. B. Griffin, R. F. Lever, P. A. Packan, J. D. Plummer // Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 64, № 10. P. 1242–1244.
10. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. М.: Наука, 1977. 656 с.