

УДК 621.315.592

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ И БЫСТРЫХ ТЕРМООБРАБОТОК ПРИ ФОРМИРОВАНИИ АКТИВНЫХ ОБЛАСТЕЙ СУБМИКРОННЫХ И НАНОМЕТРОВЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ НА КРЕМНИИ

© 2012 г. Ф. Ф. Комаров, А. Ф. Комаров, А. М. Миронов, Г. М. Заяц\*, Ю. В. Макаревич, С. А. Мискевич  
НИИПФ им. А. Н. Севченко БГУ, Беларусь,  
\*Институт математики НАН Беларуси

Рассмотрены физико–математические модели и численные алгоритмы, позволяющие достаточно точно моделировать современные технологические процессы, такие как низкоэнергетическая ионная имплантация и быстрая термообработка. Разработанный на основе этих моделей программный комплекс, интегрированный в систему сквозного моделирования процессов и приборов интегральной электроники Silvaco ATHENA, дает возможность использовать модели и методы расчета, альтернативные реализованным в известных программных продуктах, главным образом в решении задач с малой глубиной формируемых легированных областей.

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

## Введение

При создании локальных легированных областей элементов кремниевых СБИС основными технологическими процессами являются низкоэнергетическая (с энергиями 0,5—50 кэВ) ионная имплантация атомов примесей с последующими быстрыми термообработками. Сочетание такого рода имплантации и быстрого термического отжига (БТО) позволяет изготавливать приборы со сверхмалыми размерами переходов. При таких технологиях характерно образование профилей примесей сложной конфигурации [1, 2]. Экспериментальный подбор технологических режимов производства СБИС — дорогостоящий и длительный процесс, поэтому математическое моделирование является необходимым инструментом разработки и исследования используемых процессов, в частности ионной имплантации и диффузионного переноса имплантированных атомов при постимплантационных термообработках. Необходимость получать расчетные профили распределения примесей, адекватных реальным, предполагает высокий уровень физико–математических моделей низкоэнергетической ионной имплантации и БТО. Но даже последние версии программного обеспечения, предназначенного для

сквозного моделирования производства изделий микроэлектроники, не позволяют достаточно точно прогнозировать распределение легирующих примесей при быстрых высокотемпературных термообработках. У поверхности полупроводника расчетные данные, полученные при использовании таких программ, могут существенно отличаться от экспериментальных результатов [1—3]. В то же время точная информация о распределении атомов примесей во всех участках области моделирования необходима для эффективного расчета электрических характеристик полупроводниковых приборов.

Ниже рассмотрены физико–математические модели и численные алгоритмы, позволяющие достаточно точно моделировать современные технологические процессы создания элементной базы СБИС. Приведенные методы и результаты исследований основаны на более ранних публикациях [4—11].

## Моделирование процесса низкоэнергетической ионной имплантации

Модель базируется на численном решении обратных кинетических (транспортных) уравнений Больцмана. 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 используем концепцию сечений рассеяния. Если частица движется со скоростью  $v = (2E/M_1)^{1/2}$ , то вероятность рассеяния в состояние, соответствующее сечению  $d\sigma$ , за время  $\delta t$  будет равна  $Nv\delta t d\sigma$ , где  $N$  — концентрация атомов мишени, которая может зависеть от  $\mathbf{r}$ . Интеграл рассеяния должен включать в рассмотрение процессы, приводящие как к удалению частиц из состояния  $(E, \mathbf{n}, \mathbf{r})$ , так и к пополнению данного состояния  $(E, \mathbf{n}', \mathbf{r})$  за счет рассеяния [11]. Уравнение для функции распределения  $F$  получаем с учетом баланса 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 столкновения  $f_n = N|\delta\mathbf{r}|d\sigma_n'$ , характеризующегося переданной энергией  $T_n$  и появлением двух ионов: одного с энергией  $(E - T_n)$  и углом  $\mathbf{n}'$ , 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 уравнении (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  $T_e$ :

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

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 [11].

Численное решение уравнения (1) позволило получить пространственные моменты распределения ионов бора, фосфора, мышьяка, сурьмы,  $\text{BF}_2$  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 работах [12—15].

### Модель диффузии примесей в кремнии

В соответствии с современными представлениями диффузия примесей замещения в полупроводниках осуществляется с участием точечных дефектов — вакансий (V) и собственных межузельных атомов (I), которые с атомами примеси образуют подвижные примесно-вакансионные и примесно-межузельные пары. Как показано в работах [4, 16, 17], диффузионный поток примеси можно представить в виде

$$\begin{aligned} J &= -D^E \left( \text{grad}(C^V C) + \frac{C^V C}{\chi} \text{grad}\chi \right) - \\ &- D^F \left( \text{grad}(C^I C) + \frac{C^I C}{\chi} \text{grad}\chi \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $\chi$  — общая концентрация носителей заряда, нормированная к собственной концентрации носителей  $n_e$ :

$$\chi = \frac{n}{n_e} = \frac{C - C^{AC} - N + \sqrt{(C - C^{AC} - N)^2 + 4n_e^2}}{2n_e}. \quad (3)$$

Из закона сохранения частиц

$$\text{div} J + \frac{\partial C^T}{\partial t} = 0$$

и условий (2) и (3) получаем следующее нелинейное уравнение диффузии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C^T}{\partial t} &= \sum_{i=1}^p \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D^E(C) \frac{\partial (C^V C)}{\partial x_i} + \right. \\ &\left. + D^F(C) \frac{\partial (C^I C)}{\partial x_i} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial x_i} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

$p = 1, 2, 3, 0 < t \leq T$ ,

$$\text{где } D^N = \frac{C(D^E C^V + D^F C^I)}{\sqrt{(C - C^{AC} - N)^2 + 4n_e^2}}.$$

В уравнениях (2)—(4) приняты следующие обозначения:

$C^T = C + C^{AC}$  — полная концентрация примеси;

$C$  — концентрация примеси в положении замещения;

$C^{AC}$  — концентрация примесей, связанных в кластеры (в частности, для мышьяка  $C^{AC} = K\tilde{C}_D\chi^4 C^2$ , где  $K$  — характерный параметр кластеризации;  $\tilde{C}_D$  — нормализованная концентрация дефектов, участвующих в кластерообразовании);

$N$  — 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 примесно-вакансионных комплексов,

$$D^E = D_i^E \frac{1 + \beta_1^E \chi + \beta_2^E \chi^2}{1 + \beta_1^E + \beta_2^E},$$

где  $D_i^E$  — собственный коэффициент диффузии атомов по указанному вакансионному механизму;  $\beta_1^E$  и  $\beta_2^E$  — 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,

$$D^F = D_i^F \frac{1 + \beta_1^F \chi + \beta_2^F \chi^2}{1 + \beta_1^F + \beta_2^F},$$

где  $D_i^F$  — собственный коэффициент диффузии атомов примеси по механизму образования комплексов «атом примеси — собственный межузельный атом»;  $\beta_1^F$  и  $\beta_2^F$  — параметры, описывающие относительный вклад в процесс переноса примеси однократно и двукратно заряженных собственных межузельных атомов соответственно.

Уравнение (4) рассмотрим в одно-, двух- или трехмерной области  $G$  с границей  $\Gamma$  и применим для него граничные условия общего вида:

$$\alpha_1 \left[ D^E(C) \frac{\partial(C^V C)}{\partial \mathbf{n}} + D^F(C) \frac{\partial(C^I C)}{\partial \mathbf{n}} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \right] + \alpha_2 C = \alpha_3, \quad (5)$$

где  $\mathbf{n}$  — вектор нормали к границе моделирования  $\Gamma$ ; параметр  $\alpha_1$  принимает значение 0 либо 1;  $\alpha_2, \alpha_3$  — функции, зависящие от учитываемых физических явлений на границе области моделирования. В частности, при  $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = \alpha_3 = 0$  на границе  $\Gamma$  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 можно записать как

$$C^T(\mathbf{x}, t) \Big|_{t=0} = C_0(\mathbf{x}), \quad (6)$$

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

$$\frac{\partial C^{V,I}}{\partial t} = \sum_{i=1}^p \frac{\partial}{\partial x_i} \left( d^{V,I}(C) \frac{\partial C^{V,I}}{\partial x_i} + \psi_{1,i}^{V,I}(\mathbf{x}) C^{V,I} \right) - \psi_{2,i}^{V,I}(C) C^{V,I} + \psi_{3,i}^{V,I}(\mathbf{x}). \quad (7)$$

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;  $\psi_{2,i}^{V,I}(C) > 0$  — в этом слагаемом учтены средняя длина диффузионного пробега дефектов и среднее время их жизни;  $\psi_{3,i}^{V,I}(\mathbf{x})$  — функция, зависящая от скорости генерации дефектов. Более подробно эти функции описаны в работе [10]. В частности, функция  $\psi_1$  определена через скорость дрейфа точечных дефектов, вычисляемую в виде

$$v_x = -v_B \frac{\partial C^T}{\partial x},$$

где  $v_B$  — масштабный коэффициент.

Уравнение (7) замыкаем на границе  $\Gamma$  условием общего вида

$$\alpha_1 \left( d^{V,I}(C) \frac{\partial C^{V,I}}{\partial \mathbf{n}} + \psi_1 C^{V,I} \right) + \alpha_2 C^{V,I} = \alpha_3, \quad (8)$$

где  $\alpha_1$  принимает значение 0 либо 1;  $\alpha_2$  — коэффициент рекомбинации;  $\alpha_3$  — 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» [18].

Численное решение нелинейной системы уравнений (4)–(8) основано на разностном методе [19]. Построим алгоритм для трехмерной задачи ( $p = 3$ ) в случае, когда область  $G = [0, l_1] \times [0, l_2] \times [0, l_3] \times [0, T]$ . Воспользуемся локально-одномерным методом в целых шагах [19], дающим возможность существенно сократить общее число арифметических операций по сравнению с прямыми методами.

Введем сетку по времени  $\omega_t = \{t_0 = 0, t_j = \sum_{k=1}^j \tau_k, j = 1, 2, \dots, j_0, \tau_k > 0\}$ .

Поставим в соответствие уравнению (4) цепочку одномерных уравнений

$$\frac{\partial C_{(1)}^T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( D^E(C_{(1)}) \frac{\partial(C^V C_{(1)})}{\partial x_1} + D^F(C_{(1)}) \frac{\partial(C^I C_{(1)})}{\partial x_1} + D^N(C_{(1)}, C^V, C^I) \frac{\partial C_{(1)}}{\partial x_1} \right); \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_{(2)}^T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left( D^E(C_{(2)}) \frac{\partial(C^V C_{(2)})}{\partial x_2} + D^F(C_{(2)}) \frac{\partial(C^I C_{(2)})}{\partial x_2} + D^N(C_{(2)}, C^V, C^I) \frac{\partial C_{(2)}}{\partial x_2} \right); \quad (10)$$

$$\frac{\partial C_{(3)}^T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_3} \left( D^E(C_{(3)}) \frac{\partial(C^V C_{(3)})}{\partial x_3} + D^F(C_{(3)}) \frac{\partial(C^I C_{(3)})}{\partial x_3} + D^N(C_{(3)}, C^V, C^I) \frac{\partial C_{(3)}}{\partial x_3} \right); \quad (11)$$

$$t_{j-1} \leq t \leq t_j; (x_1, x_2, x_3) \in G,$$

каждое из которых дополняется граничными условиями отражения на соответствующих участках границы  $\Gamma$ .

Уравнения (9)—(11) связаны следующим образом:

$$\begin{aligned} C_{(1)} \Big|_{t=t_{j-1}} &= C_{(3)} \Big|_{t=t_{j-1}}, \quad j = 2, 3, \dots, j_0; \\ C_{(2)} \Big|_{t=t_{j-1}} &= C_{(1)} \Big|_{t=t_j}, \quad C_{(3)} \Big|_{t=t_{j-1}} = C_{(2)} \Big|_{t=t_j}, \\ j &= 1, 2, \dots, j_0; \\ C_{(1)}^T \Big|_{t=0} &= C_0(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (12)$$

Система дифференциальных уравнений (9)—(11) аппроксимирует трехмерное уравнение (4) в суммарном (интегральном) смысле. Уравнения (9)—(11) решаются совместно с уравнениями для дефектов (7), в соответствии которым, согласно локально-одномерному методу, также ставим цепочки одномерных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1^{V,I}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left( d^{V,I}(C) \frac{\partial C_1^{V,I}}{\partial x_1} + \psi_{1,1}^{V,I}(\mathbf{x}) C_1^{V,I} \right) - \\ &- \psi_{2,1}^{V,I}(C) C_1^{V,I} + \psi_{3,1}^{V,I}(\mathbf{x}); \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_2^{V,I}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_2} \left( d^{V,I}(C) \frac{\partial C_2^{V,I}}{\partial x_2} + \psi_{1,2}^{V,I}(\mathbf{x}) C_2^{V,I} \right) - \\ &- \psi_{2,2}^{V,I}(C) C_2^{V,I} + \psi_{3,2}^{V,I}(\mathbf{x}); \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_3^{V,I}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_3} \left( d^{V,I}(C) \frac{\partial C_3^{V,I}}{\partial x_3} + \psi_{1,3}^{V,I}(\mathbf{x}) C_3^{V,I} \right) - \\ &- \psi_{2,3}^{V,I}(C) C_3^{V,I} + \psi_{3,3}^{V,I}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{Здесь } \sum_{k=1}^3 \psi_{2,k}^{V,I} = \psi_2^{V,I}, \quad \sum_{k=1}^3 \psi_{3,k}^{V,I} = \psi_3^{V,I}.$$

Уравнения (13)—(15) дополняются условиями

$$\alpha_{1,i} \left( d^{V,I}(C) \frac{\partial C^{V,I}}{\partial x_i} + \psi_1 C^{V,I} \right) + \alpha_{2,i} C^{V,I} = \alpha_{3,i}, \quad j = 1, 2, 3$$

на соответствующих участках границы  $\Gamma$ .

Уравнения (13)—(15) на временном слое  $t_j$  ( $j = 1, j_0$ ) связаны соотношениями, аналогичными (12). В качестве приближенного решения задачи (4)—(8) для  $t = t_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, j_0$ , в соответствии с теорией локально-одномерного метода [19] берем функции  $C_{(3)}^T$ ,  $C_{(3)}^V$  и  $C_{(3)}^I$ .

Задача (9)—(15) решается разностным методом [20]. Разностные уравнения для соотношений (9)—(15) на сетке строятся интегроинтерполяционным методом [20].

Уравнения диффузии примеси в  $\text{SiO}_2$  и условия сопряжения на границе раздела кремний—оксид были формализованы методом, изложенным в работе [21]. Этот численный метод позволяет корректно строить алгоритм без традиционно вводимого на границе раздела сред искусственного параметра — коэффициента массопереноса. Выбор этого параметра весьма затруднителен для различных сред, примесей и температур процесса. Данные по его значениям в различных источниках существенно отличаются. Предлагаемый подход моделирования профилей примесей можно использовать и для других, не на основе кремния, сложных структур.

Как было показано в работе [22], длиннопробежная миграция неравновесных межузельных примесей, в частности бора и индия, является основным фактором в формировании «хвостов» распределений в области малой концентрации примеси как в случае ионной имплантации в кристаллический кремний, так и в случае внедрения примесей в предварительно аморфизованные слои кремния. В соответствии с этим, приведенная выше модель была усовершенствована: введен дополнительный поток диффузии неактивной межузельной примеси.

Модель была откалибрована с использованием экспериментальных данных для диффузии различных примесей в кремнии и оксиде кремния при равновесных и быстрых термообработках.

## Результаты и их обсуждение

Продолжающееся уменьшение глубины  $p$ — $n$ —переходов и поперечных размеров МОП-транзисторов приводит к широкому использованию низкоэнергетической ионной имплантации и быстрого отжига в КМОП-техпроцессах. На рис. 1 (см. третью страницу обложки) приведен пример расчета распределений активных примесей в двухмерной области в результате процесса, использующего  $p$ —HALO—легирование для подавления эффекта короткого канала: имплантация ионов As ( $2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ , 40 кэВ), имплантация ионов бора ( $2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ , 2 кэВ), имплантация ионов бора ( $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , 4 кэВ), отжиг 10 с при 1000 °С.

Для оценки корректности рассмотренной модели также сравнивали результаты расчетов с экспериментальными данными из работ [23] и [1]. На рис. 2 и 3 приведены результаты моделирования процессов

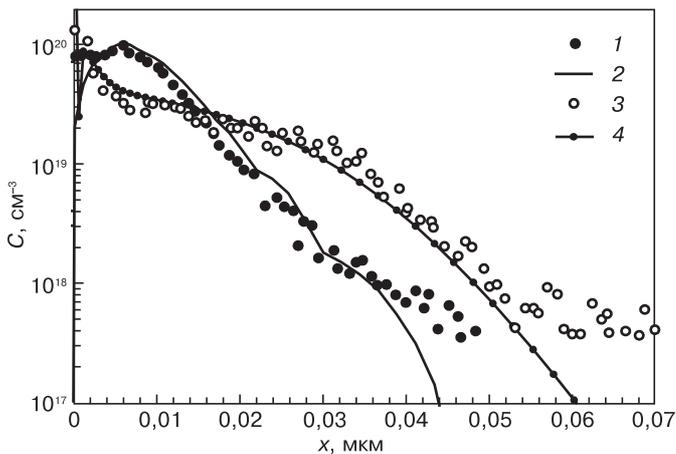


Рис. 2. Профили распределения имплантированного в кремний бора: 1 — данные ВИМС; 2 — расчет; 3 — данные ВИМС, согласно работе [23], для имплантированного в кремний с дозой  $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  и энергией 2 кэВ бора, который затем в течение 10 с подвергали отжигу при температуре  $1000 \text{ }^\circ\text{C}$ ; 4 — результаты моделирования

низкоэнергетической имплантации бора и мышьяка с последующими быстрыми термообработками.

На рис. 2 результаты расчета сравниваются с данными эксперимента [23], в котором бор имплантировали в кремний с дозой  $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  и энергией 2 кэВ, а затем проводили отжиг при  $1000 \text{ }^\circ\text{C}$  в течение 10 с. Параметры модели:  $\beta_1 = 0,7$ ,  $\beta_2 = 0$ ; в граничных условиях (5) для бора на границе оксид—воздух  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 5 \cdot 10^2 \text{ мкм}^{-4}$ ,  $\alpha_3 = 0$ ; для дефектов (собственных междоузлий кремния) в выражении (8) на границе кремния  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 10^{14} \text{ мкм}^{-4}$ ,  $\alpha_3 = 0$ ;  $\nu_B = 10^{-14}$ .

На рис. 3 приведены результаты, соответствующие имплантации ионов  $\text{As}^+$  в кремний с энергией 5 кэВ и БТО с температурами 850 и  $950 \text{ }^\circ\text{C}$ , а также результаты моделирования с использовани-

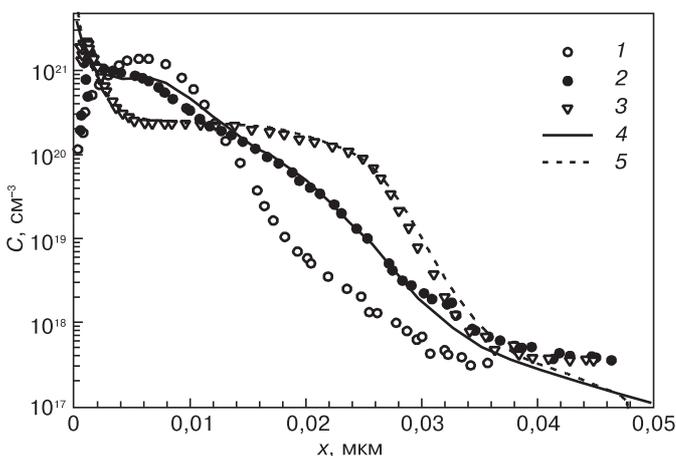


Рис. 3. Результаты расчетов и экспериментальные данные из работы [1] для ионов мышьяка, имплантированных в кремний с энергией 5 кэВ и дозой  $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ , а затем термообработанных (БТО): 1, 2, 3 — измеренные методом времяпролетной ВИМС экспериментальные профили имплантированного мышьяка, а также мышьяка, подвергшегося отжигу при 850 и  $950 \text{ }^\circ\text{C}$  соответственно; 4, 5 — результаты моделирования БТО при 850 и  $950 \text{ }^\circ\text{C}$  соответственно. Для расчетов использовали разработанные авторами модели

ем предложенных авторами моделей. В работе [1] имплантацию ионов мышьяка с дозой  $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$  в кремниевую подложку проводили при комнатной температуре при различных энергиях: 5, 10 и 15 кэВ. Далее образцы подвергали БТО в азотной среде в диапазоне температур  $650\text{—}950 \text{ }^\circ\text{C}$  и времени 10—30 с. Затем с помощью метода вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) были получены профили распределения. Параметры модели: толщина слоя  $\text{SiO}_2$  — 0,01 мкм, параметры ГУ (5) на границе оксид—воздух:  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 5 \cdot 10^{-6} \text{ мкм}^{-4}$ ,  $\alpha_3 = 0$ ; для точечных дефектов на границе  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ :  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 10^{14} \text{ мкм}^{-4}$ ,  $\alpha_3 = 10^{-9} \text{ мкм}^{-3}$ ,  $\nu_B = 10^{-20}$ ,  $\beta_1 = 3,67$ ,  $\beta_2 = 1,34$ .

Результаты расчетов с достаточной точностью соответствуют измеренным методом ВИМС профилям, включая приповерхностную область, где наблюдается «восходящая диффузия» и формирование локального максимума вблизи границы  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ . У поверхности кремния происходит рекомбинация собственных междоузельных атомов, что приводит к появлению дополнительного потока примеси.

## Заключение

Разработаны модели процессов низкоэнергетической ионной имплантации и БТО. На основе этих моделей создан программный комплекс, который позволяет использовать эти модели и методы расчета в решении задач с малой глубиной формируемых легированных областей. С помощью разработанного программного обеспечения проведено моделирование различных процессов, в том числе имплантации ионов В,  $\text{BF}_2$ , Р, As, Sb, С в кремниевые структуры, соответствующие типичным сильнолегированным активным областям элементов современных СБИС, и последующего БТО. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными методом ВИМС.

## Библиографический список

1. Girginoudi, D. Studies of ultra shallow  $n^+p$ -junctions formed by low-energy As-implantation / D. Girginoudi, N. Georgoulas, A. Thanailakis, E.A. Polycroniadis // Mater. Sci. and Eng. B. — 2004. — V. 114—115. — P. 381—385.
2. Solmi, S. Transient enhanced diffusion of As in Si / S. Solmi, M. Ferri, M. Bersani // J. Appl. Phys. — 2003. — V. 94, N 8. — P. 4950—4955.
3. Ruffell, A. Annealing behavior of low-energy ion-implanted P in Si / A. Ruffell, I. V. Mitchell, P. Simpson // Ibid. — 2005. — V. 97. — P. 123518 1–6.
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. — V. 74. — P. 035205–1—035205–10.
5. Komarov, F. F. 2D modelling of the diffusion of low-energy implanted arsenic in silicon at rapid thermal annealing / F. F. Komarov, A. M. Mironov, G. M. Zayats, V. A. Tsurko, O. I. Velicko, A. F. Komarov, A. I. Belous // Vacuum // Vacuum. — 2007. — V. 81. — P. 1184—1187.
6. Мильчанин, О. В. Улучшение параметров мелких  $p^+n$ -переходов в кремнии путем дополнительных имплантаций ионов углерода и ступенчатых термообработок / О. В. Мильчанин, Ф. Ф. Комаров, В. И. Плебанич, П. И. Гайдук, А. Ф. Комаров // Докл. НАН Беларуси. — 2007. — Т. 51, № 2. — С. 40—44.

7. **Комаров, Ф. Ф.** Формирование однородно легированных слоев в металлах и полупроводниках методом полиэнергетической высокодозной ионной имплантации / Ф. Ф. Комаров, А. Ф. Комаров, А. М. Миронов // Там же. – 2007. – Т. 51, № 3. – С. 52–56.

8. **Комаров, Ф. Ф.** Simulation of rapid thermal annealing of low-energy implanted arsenic in silicon / F. F. Komarov, A. F. Komarov, A. M. Mironov, G. M. Zayats, V. A. Tsurko, O. I. Velichko // Phys. and Chem. of Solid State. – 2007. – V. 8, N 3. – P. 494–499.

9. **Mironov, A. M.** Modelling of low-energy-implanted phosphorus diffusion during rapid thermal processing of the semiconductor structures / A. M. Mironov, F. F. Komarov, A. F. Komarov, V. A. Tsurko, G. M. Zayats, O. I. Velichko // Vacuum. – 2009. – V. 83. – P. S127–S130.

10. **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 // Материалы Седьмой Междунар. конф. «Автоматизация проектирования дискретных систем». – Минск, 2010. – С. 370–376.

11. **Буренков, А. Ф.** Пространственные распределения энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений в твердых телах / А. Ф. Буренков, Ф. Ф. Комаров, М. А. Кумахов. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 245 с.

12. **Hobler, G.** Two-dimensional modelling of ion implantation with spatial moments / G. Hobler, E. Langer, S. Selberherr // Solid-State Electronics. – 1987. – V. 30, N 4. – P. 445–455.

13. **Burenkov, A. F.** Two-dimensional local ion implantation distribution / A. F. Burenkov, A. G. Kurganov, G. G. Konoplyanik // Surface Sciences. – 1989. – V. 8. – P. 52.

14. **Lorenz J.**, Simulation of the lateral spread of implanted ions: theory. / Lorenz J., Kruger W., Barthel A. // Proc. NASECODE-VI – Boole Press, 1989. – P. 513–520.

15. **Parab, K. V.** Analysis of ultra-shallow doping profiles obtained by low energy ion implantation / K. V. Parab, D. H. Yang, S. J. Morris, S. Tian, A. F. Tasch, D. Kamenitsa, R. Simonton, C. Mahee // J. Vac. Sci. and Techn. B. – 1996. – V. 4, N 1. – P. 260.

16. **Fedotov, A. K.** Set of equations for stress-mediated evolution of the nonequilibrium dopant-defect system in semiconductor crystals / A. K. Fedotov, O. I. Velichko, V. A. Dobrushkin // J. Alloys and Compounds. – 2004. – V. 382, Iss. 1–2. – P. 283–287.

17. **Komarov, F. F.** Numerical algorithms for modeling of diffusion of As implanted in Si at low energies and high fluences / F. F. Komarov, O. I. Velichko, A. M. Mironov, V. A. Tsurko, G. M. Zayats // Proc. SPIE. – 2006. – V. 6260. – P. 566–574.

18. **Griffin, P. B.** Doping and damage dose dependence of implant induced TED below the amorphization threshold / P. B. Griffin, R. F. Lever, P. A. Packan, J. D. Plummer // Appl. Phys. Lett. – 1994. – V. 64, N 10. – P. 1242.

19. **Самарский, А. А.** Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1977. – 656 с.

20. **Komarov, F. F.** Numerical simulation of impurity diffusion at the formation of ultrashallow doped areas in semiconductors / F. F. Komarov, A. F. Komarov, A. M. Mironov, O. I. Velichko, V. A. Tsurko, G. M. Zayats // J. Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2010. – V. 13, N 4. – P. 389–395.

21. **Величко, О. И.** Моделирование диффузии мышьяка в системе SiO<sub>2</sub>/Si при низкоэнергетической имплантации и коротком термическом отжиге / О. И. Величко, Г. М. Заяц, А. Ф. Комаров, А. М. Миронов, В. А. Цурко // Материалы VII Междунар. конф. «Взаимодействие излучений с твердым телом». – Минск (Беларусь), 2007. – С. 96–98.

22. **Velichko, O. I.** Modeling of the transient interstitial diffusion of implanted atoms during low-temperature annealing of silicon substrates / O. I. Velichko, A. P. Kavaliyova // Physica B. – 2012. – V. 407. – P. 2176–2184.

23. **Boucard, F. A.** Comprehensive solution for simulating ultra-shallow junctions: From high dose/low energy implant to diffusion annealing / F. Boucard, F. Roger, I. Chakarov, V. Zhuk, M. Temkin, X. Montagner, E. Guichard, D. Mathiot // Mater. Sci. and Eng. B. – 2005. – V. 124–125. – P. 409–414.



**МИСИС**  
ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ДОМ

НАШ КНИЖНЫЙ

**Адрес:** Ленинский проспект, д. 4,  
главный корпус МИСИС,  
цокольный этаж.  
Тел.: (495) 638-44-28,  
(495) 638-45-31

## В МИСИС открылся современный книжный магазин

В магазине представлены: научная, учебная и учебно-методическая литература, выпускаемая Издательским Домом МИСИС, в том числе следующие издания:

**Блистанов А. А.** Кристаллы квантовой и нелинейной оптики. – М.: • МИСИС •, 2007. – 432 с., ISBN 978-5-87623-182-6.  
Рассмотрены особенности получения, структура, дефекты и свойства кристаллов, используемых в лазерной, нелинейной и акустооптике.

**Горелик С. С., Дашевский М. Я.** Материаловедение полупроводников и диэлектриков. 2-ое издание, переработанное и доп. – М.: • МИСИС •, 2003. – 480 с., ISBN 5-87623-018-7.  
Рассмотрены свойства различных полупроводниковых и диэлектрических материалов и частично металлов, используемых в твердотельной электронике.

**Кожитов Л. В., Косушкин В. Г., Крапухин В. В., Пархоменко Ю. Н.** Технология материалов микро- и нанoeлектроники. – М.: • МИСИС •, 2007. – 544 с., ISBN 978-5-87623-132-7.  
Книга предназначена для широкого круга научных и инженерно-технических работников, специализирующихся в области получения и исследования материалов микро- и нанoeлектроники.

Книги можно приобрести за наличный и безналичный расчет.