МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ ДЕФЕКТОВ В ИОННО-ОБЛУЧЕННОМ КРЕМНИИ: УСЕЧЕННАЯ ВЕРСИЯ

В.И. Белько
Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, Минск 220030, Беларусь, belko@bsu.by

Для моделирования процесса формирования {311}-дефектов в кремнии во время постимплантационного отжига применяется модель, которая состоит из шести обыкновенных дифференциальных уравнений реакции, описывающих динамику свободных междоузлий, малых кластеров междоузлий трех размеров, концентрацию междоузлий в {311}-дефектах и концентрацию {311}-дефектов. Получены концентрации собственных междоузлий в {311}-дефектах в зависимости от времени при типичных значениях температуры отжига. Показано, что данная компактная модель является приемлемой и в то же время намного более экономичной альтернативой для модели, основанной на полной системе уравнений реакции.

Ключевые слова: ионная имплантация; отжиг; собственные междоузлия; {311}-дефекты в кремнии; моделирование.

MODEL OF THE FORMATION OF DEFECT CLUSTERS IN ION-IRRADIATED SILICON: COMPACT VERSION

Viktor Belko
Belarusian State University,
4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus, belko@bsu.by

To simulate the formation of {311}-defects in silicon during post-implantation annealing, a model is used that consists of six ordinary differential equations that describe the dynamics of free interstices, small clusters of interstices of three sizes, the concentration of interstices in {311} defects, and the concentration of {311 }-defects. The concentrations of intrinsic interstices in {311}-defects in silicon are obtained as a function of time at typical annealing temperatures. It is shown that this compact model is an acceptable and at the same time much more economical alternative to the model based on the full system of reaction equations.

Keywords: ion implantation; annealing; self-interstitials; {311}-defects in silicon; modeling.

Введение

Для успешной разработки и оптимизации технологии изготовления интегральных схем необходимо проводить моделирование имплантации ионов и отжига образовавшихся дефектов, учитывая временно-ускоренную диффузию. Для моделирования физических процессов, определяющих ход имплантации и последующего отжига, применяются квантово-химические расчеты, классическая молекулярная динамика, кинетический метод Монте-Карло и численное решение уравнений реакции-диффузии. При моделировании с помощью численного решения уравнений реакции-диффузии [1] интересующие нас физические процессы могут быть описаны системой дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа, где появление или исчезновение междоузлий и их кластеров различного размера определяется скоростями этих процессов и диффузионными параметрами. Наряду с указанной моделью, для моделирования роста кластеров собственных междоузлий и формирования {311}-дефектов в кремнии во время постимплантационного отжига применяется система обыкновенных дифференциальных уравнений реакции, которая может быть получена из системы уравнений реакции-диффузии интегрированием искомых функций по пространству [2]. При этом в модели учитываются кластеры междоузлий всех размеров до заданного N, которое совпадает с количеством уравнений в системе. (Типичными значениями N являются 200, 500, 1000.)

В данной работе рассматривается модель, которая состоит лишь из шести уравнений реакции, описывающих динамику свободных междоузлий, малых кластеров междоузлий трех размеров, концентрацию междоузлий в {311}-дефектах и концентрацию {311}-дефектов. Указанная модель аналогична, но не совпадает с моделями, предложенными в [3, 4].

Основная часть

Сформулируем математическую модель, описывающую перераспределение одиночных междоузлий и междоузлий в кластерах во время отжига ионно-имплантированного кремния. Уравнения, описывающие поведение свободных междоузлий I, кластеров междоузлий трех размеров (I_2, I_3, I_4), концентрацию междоузлий в {311}-дефектах C_{311}, концентрацию {311}-дефектов D_{311}:

$$\frac{dI}{dt} = -2k_1^+ I^2 + 2k_2^- I_2 -$$

$$-k_2^+ I\, I_2 + \sum_{n=3}^{4}(k_n^- I_n - k_n^+ I I_n) + k_\infty^- D_{311} - k_\infty^+ I D_{311}$$

$$\frac{dI_2}{dt} = k_1^+ I^2 - k_2^+ I I_2 - k_2^- I_2 + k_3^- I_3$$

$$\frac{dI_3}{dt} = k_2^+ I I_2 - k_3^+ I I_3 - k_3^- I_3 + k_4^- I_4$$

$$\frac{dI_4}{dt} = k_3^+ I I_3 - k_4^- I_4 + k_\infty^- D_{311} - k_4^+ I I_4$$

$$\frac{dC_{311}}{dt} = 5k_4^+ I I_4 + k_\infty^+ I D_{311} - 5k_\infty^- D_{311}$$

$$\frac{dD_{311}}{dt} = k_4^+ I I_4 - k_\infty^- \cdot \frac{D_{311}}{C_{311}} D_{311},$$

где k_∞^+ – параметр, описывающий поглощение междоузлий {311}-дефектами, k_∞^- – параметр, описывающий эмиссию междоузлий из {311}-дефектов, k_n^+, k_n^- – кинетические коэффициенты прямой и обратной реакций для кластера размера n, соответственно. Среднее количество свободных междоузлий в {311}-дефектах описывается отношением C_{311}/D_{311}. Эмиссия свободных междоузлий из кластеров трех размеров описывается параметрами k_2^-, k_3^-, k_4^-, значения которых определяются энергиями связи E_B и взяты из работы [3].

Применим данную модель для описания процесса формирования {311}-дефектов в кристалле кремния во время отжига при различных температурах в результате роста кластеров собственных междоузлий, образовавшихся после имплантации ионов кремния с энергией 40 кэВ и дозой $5\cdot10^{13}$ см$^{-2}$. Начальное распределение собственных междоузлий определим в соответствии с «+1-моделью», когда на один внедренный атом после первой быстрой стадии рекомбинации дефектов приходится одно междоузлие.

Концентрации междоузлий в {311}-дефектах в ионно-имплантированном кремнии в течение постимплантационного отжига в зависимости от времени при температурах 670, 705, 738 и 815 С, полученные в результате расчетов, представлены на рисунке 1. Те же величины, экспериментально полученные в работе [4], представлены на рисунке 2. Здесь интерес для нас представляют только зависимости, показанные символами: 670 С – квадраты; 705 С – круги; 738 С – треугольники, 815 С – ромбы.

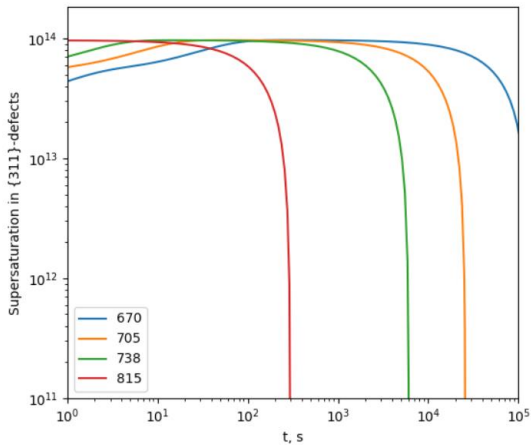

Рис. 1. Концентрация собственных междоузлий в {311}-дефектах в зависимости от времени при температурах 670, 705, 738 и 815 С

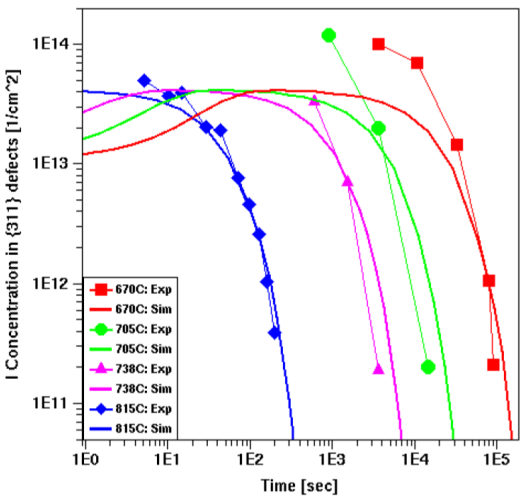

Рис. 2. Концентрация свободных междоузлий в {311}-дефектах в зависимости от времени при температурах 670, 705, 738 и 815 С (эксперимент)

По сравнению с полной моделью, когда необходимо многократно получать решение жесткой системы из большого числа уравнений (порядка 1000), усеченная модель дает существенный выигрыш в скорости. Удовлетворительная точность результатов усеченной модели может быть объяснена, с одной стороны, удачным выбором «базовых» размеров малых кластеров междоузлий, и, с другой стороны, использованием специально подобранных коэффициентов прямых и обратных реакций, полученных в работе [3] методами оптимизации при обратном моделировании.

Заключение

Для моделирования роста кластеров собственных междоузлий и формирования {311}-дефектов в кремнии во время постимплантационного отжига применяется модель, которая состоит из шести обыкновенных дифференциальных уравнений реакции, описывающих динамику свободных междоузлий, малых кластеров междоузлий трех размеров, концентрацию междоузлий в {311}-дефектах и концентрацию {311}-дефектов. Получены концентрации собственных междоузлий в {311}-дефектах в зависимости от времени при различных значениях температуры отжига. Показано, что данная компактная модель является приемлемой и в то же время намного более экономичной альтернативой для модели, основанной на полной системе уравнений реакции.

Библиографические ссылки

1. Ortiz C.J., Cristiano F., Colombeau B., Claverie A., Cowern N.E.B. Modeling of extrinsic extended defect evolution in ion-implanted silicon upon thermal annealing. *Materials Science and Engineering B* 2004; 114-115: 184-192.
2. Cowern N.E.B., Mannino G., Stolk P.A., Roozeboom F., Huizing H.G.A., van Berkum J.G.M. Energetics of Self-Interstitial Clusters in Si. *Physical Review Letters* 1999; 82(22): 4460-4463.
3. Heitzinger C., Selberherr S. On the simulation of the formation and dissolution of silicon self-interstitial clusters and the corresponding inverse modeling problem. *Microelectronics Journal* 2004; 35; 167-171.
4. Zographos N., Zechner C., Avci I. (2007). Efficient TCAD model for the evolution of interstitial clusters, {311} defects, and dislocation loops in silicon. *MRS Online Proceedings Library (OPL)* 2007; 994.