

На правах рукописи

Баранов Глеб Владимирович

**ЭФФЕКТЫ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФЕКТОВ
И ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ
SI ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ**

Специальность 05.27.01 –
твёрдотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,
микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2018

Работа выполнена в Акционерном обществе «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники» (АО «НИИМЭ») и в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» (МФТИ)

Научный руководитель:

Итальянцев Александр Георгиевич, д-р физ.-мат. наук, акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники» (АО «НИИМЭ»), начальник отдела функциональной электроники.

Официальные оппоненты:

Попов Владимир Павлович, д-р физ.-мат. наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией физических основ материаловедения кремния;

Горшков Олег Николаевич

канд. физ.-мат. наук, доцент, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (ННГУ), директор Научно-образовательного центра «Физика твердотельных наноструктур» (НОЦ ФТНС).

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технологический институт Российской академии наук (ФТИАН РАН)

Защита состоится «__» _____ 2018 года в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.081.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук по адресу: 142432, Московская область, г. Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д. 6, ИПТМ РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПТМ РАН и на сайте http://www.iptm.ru/tes_council/diss.ru.html

Автореферат разослан «__» _____ 2018 г.

Учёный секретарь

диссертационного совета Д 002.081.01,

канд. физ.-мат. наук

А.В. Иржак

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Предметом диссертационной работы являются теоретические и экспериментальные исследования особенностей пространственного распределения радиационных и радиационно-термических дефектов, а также связанное с ними специфическое распределение имплантированных примесных атомов в слоистых структурах на основе Si в целом и в субмикронные локальные окна в частности.

Рассмотренные в литературе эффекты перераспределения примесных атомов в слоистых структурах в основном связывают с нормальными механическими напряжениями и сегрегацией примеси на границе раздела фаз [1-3]. Однако, как показано в диссертационной работе, адекватное описание эффектов диффузии не может быть корректно проведено без учета особенностей формирования первичного фона радиационных дефектов в области границ раздела слоистых структур, а также без поправок на тангенциальные механические и электрические поля в окнах нанометрового диапазона.

В связи с этим научная актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что она предполагает исследование нового, ранее не изученного фактора, связанного с особенностями распределения первичных радиационных пар Френкеля вблизи границы слоистых структур, который способен практически значимо влиять как на вторичное дефектообразование, так и на итоговое пространственное распределение имплантированных примесных атомов в слоистых структурах на основе Si.

Прикладная актуальность темы обусловлена постоянным ужесточением требований к точности построения ионно-легированных профилей в передовых конструкциях приборов микроэлектроники по мере масштабирования топологических норм. Кроме того, практическая значимость определяется еще и тем, что предмет исследований направлен на изучение основного метода легирования – ионная имплантация и объекта – слоистые структуры в современной микроэлектронике. В частности, практически важными задачами являются: предельное повышение поверхностной концентрации примесных атомов, уменьшение глубины залегания p-n переходов, а также максимально резкие профили распределения примеси. Важным объектом исследования являются также дефекты радиационно-термического происхождения, которые, как показано в последнее время [4-6], могут лежать в основе создания

светоизлучающих центров в кремнии в качестве альтернативы центров в GaAs, сложно совмещаемого с кремниевой КМОП технологией.

Степень разработанности темы

Физика образования неравновесных собственных точечных дефектов является одним из базовых разделов радиационной физики полупроводников, развиваемых многочисленными научными школами в России и за рубежом. Благодаря обширным исследованиям в этой области установлено, что целенаправленное формирование фона неравновесных радиационных дефектов достаточно эффективно в вопросах управления ионно-легированными профилями. Исходный фон неравновесных собственных точечных дефектов также может быть сформирован за счет химически стимулированного введения точечных дефектов [7], за счет распада радиационно-термических кластеров. И, тем не менее, как оказалось, даже в случае наиболее изученных дефектов радиационного происхождения имеется ряд новых следствий, вытекающих из особенностей распределения первичных пар Френкеля в области границ раздела различных фаз в слоистых структурах, которые и легли в основу предмета диссертационных исследований.

Цель и задачи

Цель диссертационной работы – развитие научно-технологической базы для создания перспективных приборов Si микроэлектроники и улучшения параметров передовых изделий путём исследования новых подходов к управлению профилем примесных атомов в ионно-легированных слоях гетероструктур на основе Si.

Для достижения цели в работе поставлены и решены следующие научные задачи:

- Предложить и теоретически обосновать возможность создания пространственного распределения радиационных дефектов при ионной имплантации, не свойственного традиционному фону радиационных дефектов в объемном кремнии, разработать соответствующие модельные представления;
- Экспериментально исследовать особенности распределения радиационных дефектов в слоистых гетероструктурах на основе кремния при ионной имплантации в условиях модельных предположений;
- Разработать количественную модель вторичных эффектов, связанных с диффузионным перераспределением примесных атомов в Si, в условиях

созданного специфического фона радиационных дефектов;

- Экспериментально подтвердить вторичные эффекты, связанные со специфическими пространственными распределениями примесей при использовании гетероструктур для формирования ионно-легированных слоев;
- Теоретически исследовать особенности формирования силовых полей в области ионного облучения по мере уменьшения топологического размера окна в маске.

Научная новизна

1. Впервые для различных слоистых гетерогенных структур теоретически обоснована и экспериментально подтверждена возможность термически устойчивого интегрального разделения компонентов пар Френкеля, возникающих при ионной имплантации в слоистые структуры. Разработана феноменологическая модель пространственного разделения радиационных вакансий (V) и собственных междоузлий (I) на интерфейсе гетероструктур на основе Si. Показано, что при выборе определенных параметров имплантации может быть сформирован и на начальных стадиях отжига сохранен нетиповой фон радиационных дефектов в Si, что позволяет ускорить или затормозить диффузию имплантированных примесных атомов.

2. На примере SiO₂-Si, TiN-Si и Si₃N₄-Si структур методами обратного резерфордского рассеяния и рентгеновской дифрактометрии, путем исследования непосредственно фона дефектов, экспериментально подтверждены основные положения феноменологической модели устойчивого интегрального пространственного разделения радиационных V и I при имплантации в область границ раздела указанных структур тяжелых ионов. В частности, показана возможность многократного пересыщения слоев Si собственными междоузлиями в составе вторичных комплексов и кластеров за счет того, что пространственно отделенная от Si большая часть вакансий оставалась в слоях SiO₂, TiN, Si₃N₄ и не могла проникнуть в Si.

3. Эффективность управления диффузионными процессами примесных атомов за счет создания нетипового фона радиационных дефектов продемонстрирована на примере имплантации в модельных условиях ионов Sb и As в структуру SiO₂-Si. Впервые показано, что при этом диффузия атомов Sb в Si на стадии постимплантационного отжига может быть практически полностью подавлена, а диффузия атомов As в Si имеет сложный характер и включает элемент «восходящей диффузии».

4. Разработана оригинальная количественная модель диффузионного перераспределения атомов As в составе комплексов с I, имплантированных в границу раздела структуры SiO₂-Si, впервые учитывающая пространственную сепарацию V и I на интерфейсе структуры. Модельные расчеты адекватно описывают эксперимент и, в отличие от моделей-аналогов, не требуют для описания экспериментальных фактов привлечения эффектов сегрегации примеси на границе раздела Si-SiO₂.

Практическая значимость

1. Разработаны физико-технологические основы формирования активных малоразмерных областей с управляемыми профилями легирования основных типов донорных и акцепторных атомов, интегрируемые в традиционную Si технологию микроэлектроники.

2. Создана численная модель, позволяющая прогнозировать диффузионный профиль примесных атомов As, имплантированных в структуру SiO₂-Si в условиях устойчивого разделения компонентов радиационных пар Френкеля на границе раздела фаз структуры.

3. Определены критические размеры мелкозалегающих ионно-имплантированных областей, при которых существенное влияние на их формирование в части коррекции металлургической границы будут оказывать механические и электрические поля, связанные с присутствием маскирующего слоя.

Положения, выносимые на защиту

1. Эффект и принципы реализации устойчивого интегрального разделения компонент радиационных пар Френкеля на границе раздела фаз слоистых гетероструктур на основе Si, позволяющий создать уникальную для радиационной физики ситуацию качественного изменения соотношения концентраций, запасенных в объеме кремния, в пользу только I или только V в области формирования профиля примесных атомов.

2. Экспериментальное подтверждение особенностей распределения вакансий и собственных атомов в междоузлиях в окрестности межфазных границ радиационно-облученных слоистых структур на основе Si, состоящих в устойчивом интегральном сепарировании радиационных вакансий и междоузлий на границе раздела фаз, выполненное методами рентгеновской дифрактометрии.

3. Экспериментальные подтверждения особенностей диффузии примесных атомов на фоне пересыщения решетки кремния радиационными дефектами

одного типа, а также выполненные оценки параметров пересыщенных растворов дефектов и степени усиления или подавления скорости диффузионных размытий ионно-имплантированных профилей легирующей примеси на примере Sb и As.

4. Оригинальная количественная модель сложного диффузионного перераспределения ионно-имплантированных в границу раздела структуры SiO₂-Si атомов As, включающего разнонаправленные потоки атомов в составе комплексов с междоузлиями, учитывающая особенности сформированного в таких условиях фона первичных радиационных дефектов и позволяющая прогнозировать диффузионный профиль As при других параметрах эксперимента.

5. Количественные оценки размерных факторов ионно-имплантированных областей, при которых существенное влияние на их формирование в части коррекции металлургической границы будут оказывать механические и электрические поля, связанные с присутствием маскирующего слоя.

Достоверность научных положений, результатов и выводов

Достоверность результатов обусловлена использованием современных методов диагностики материалов, комплексным подходом в их применении, достаточной точностью и воспроизводимостью используемых технологических процессов, подтвержденных их применением в действующем производстве интегральных микросхем, а также непротиворечивостью полученных результатов фундаментальным положениям физики полупроводников в целом и радиационной физики, в частности.

Апробация результатов

Результаты диссертационной работы были представлены на следующих конференциях и семинарах:

- 1) IV Всероссийская конференция «Физические и физико-химические основы ионной имплантации» (Новосибирск, 2012);
- 2) 55-ая научная конференция МФТИ (Долгопрудный, 2012);
- 3) 56-ая научная конференция МФТИ (Долгопрудный, 2013);
- 4) X Конференция «Кремний-2014» (Иркутск, 2014);
- 5) V Всероссийская конференция «Физические и физико-химические основы ионной имплантации» (Нижний Новгород, 2014);
- 6) 11-ое заседание междисциплинарного научно-практического семинара по проблеме «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур» ФИЦ ИУ РАН (Москва, 2018);

- 7) 26th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology" (Minsk, 2018);
- 8) XII Международная Конференция «Кремний-2018» (Черноголовка, 2018)

Публикации

По теме диссертации опубликовано 9 работ в научных журналах и сборниках трудов международных и российских конференций, в том числе 3 работы в рецензируемых журналах, входящих в действующий перечень ВАК.

Личный вклад автора

Все результаты теоретических исследований, а также разработанные на их основе физико-математические модели, представленные в настоящей диссертации, получены автором лично, либо при его непосредственном и определяющем участии. Разработка постановки экспериментов, а также технических заданий на изготовление экспериментальных образцов и проведение аналитических исследований выполнены автором, а проведение измерений в части рентгеновской дифрактометрии, вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) и спектроскопии резерфордского обратного рассеяния (RBS) – в специализированных центрах. Участие коллег автора в проведении исследований и интерпретации их результатов отражено в виде их соавторства в опубликованных работах или докладах на конференциях.

Результаты диссертационной работы, составляющие научную новизну, практическую ценность и выносимые на защиту, получены автором лично под научным руководством д-ра физ.-мат. наук Итальянцева А.Г.

Структура и объём работы

Диссертационная работа включает список используемых сокращений, введение, четыре главы, основные результаты работы и выводы, список работ, опубликованных по теме диссертации, список цитируемой литературы из 82 наименований и содержит 132 страницы, в том числе 51 рисунок и 3 таблицы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность работы, сформулированы её цель и задачи, излагаются положения научной новизны, практической значимости, а также сформулированы положения, выносимые на защиту.

Первая глава в основном посвящена аналитическому обзору литературных материалов по теме диссертационных исследований, поставлены

основные задачи работы. Обзор посвящён процессам радиационного дефектообразования и диффузии примесных атомов в Si в условиях пересыщенного твердого раствора собственных точечных дефектов (СТД) радиационного происхождения, а также сопутствующим им явлениям. В рамках обзора особое внимание уделяется анализу пространственного распределения первичных радиационных дефектов в Si и хорошо известному факту пространственного разделения профилей первичных V и I в гомогенной матрице, на основе которого строятся основные рассуждения диссертационной работы.

Кроме того, обсуждаются прикладные задачи стимулированной диффузии примесных атомов и вторичного радиационно-термического дефектообразования в Si.

Во **второй главе** впервые теоретически обоснована и экспериментально подтверждена возможность термически устойчивого интегрального разделения компонентов пар Френкеля, возникающих при ионной имплантации в различные слоистые гетерогенные структуры, при котором становится возможным получить в области диффузии имплантированной примеси сильные пересыщения только по вакансиям или собственным атомам в междоузлиях.

В рамках разработанных модельных представлений упомянутые особенности становится возможным создать благодаря различной диффузионной прозрачности фаз структуры для СТД и особым правилам имплантации, состоящим в контроле соотношения между средним проецированным пробегом ионов (R_p) и толщиной слоев структуры. Пользуясь положениями теории пробега, для двухслойных структур в качестве критерия наблюдения эффекта предложено использовать равенство R_p толщине слоя с некоторыми поправками, через который ведется имплантация. Показано, что в таком случае могут быть созданы уникальные для радиационной физики ситуации пересыщения кремния по одному типу СТД. В качестве примера реализации таких ситуаций рассмотрено два типа структур микроэлектроники с принципиально отличным результатом формирования первичного дефектного фона в Si. Первый тип структуры – ***КНИ структура***, в которой при имплантации в модельных условиях достигается вакансионное пересыщение приборного слоя Si. Второй тип структуры – структура типа ***диэлектрик – Si***, с преимущественным пересыщением кремния по собственным междоузельным атомам (рис.1).

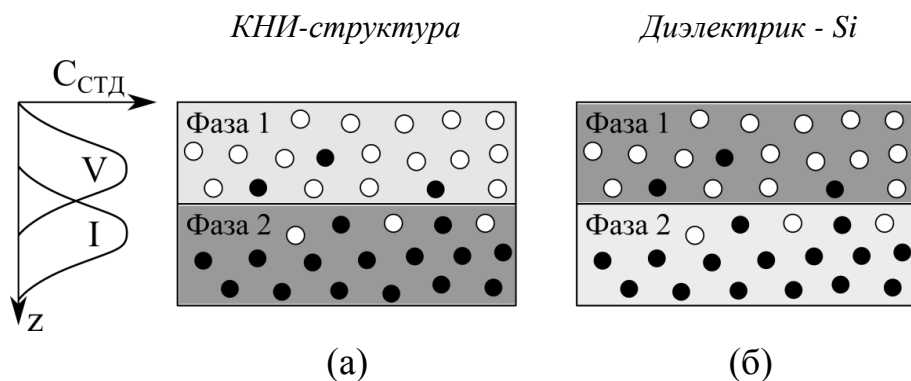


Рисунок 1. Качественная картина разделения компонент пар Френкеля (● – междоузельные атомы, ○ – вакансии) в *KHI* структурах ($D_1^I \gg D_2^I$) (а) и структурах типа *диэлектрик – Si* ($D_1^V \ll D_2^V$) (б)

Акцентируется внимание на том, что полученная картина разделения радиационных дефектов устойчива к последующим термическим воздействиям и существенно зависит от массы и энергии имплантируемых ионов. Показано, что снижение энергии имплантации будет способствовать повышению отношения Δ/R_p (Δ – глубина разделения максимумов I и V) и уменьшению дисперсии распределения первичных дефектов, что упрощает задачу практической реализации эффекта разделения. Снижение энергии имплантации сопровождается усилением стока дефектов на межфазную границу ввиду пространственного приближения границы к области дефектообразования. Для тяжелых ионов этот эффект будет ниже из-за формирования сильносвязанных разупорядоченных областей.

Экспериментально подтверждены основные положения феноменологической модели устойчивого интегрального пространственного разделения радиационных V и I на межфазных границах слоистых структур $\text{SiO}_2\text{-Si}$, TiN-Si и $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$, облученных тяжёлыми ионами в модельно определенных условиях.

Методами рентгеновской дифрактометрии на частном примере структуры $\text{SiO}_2\text{-Si}$ с толщиной $\text{SiO}_2 \sim 30\text{nm}$ проведено исследование особенностей распределения радиационных дефектов в Si после имплантации инертных тяжелых ионов Kr^+ в область межфазной границы структуры. Асимметрия кривой дифракционного отражения (КДО) в сторону отрицательных отклонений от брегговского положения пика подложки свидетельствует о рассеянии на матрице с большим по отношению к Si периодом решетки, что характеризует пересыщение Si собственными междоузельными атомами (рис.2а). Измерения карт обратного пространства в окрестности узла Si(004)

показали, что вклад диффузного рассеяния рентгеновских лучей на кластерах радиационных дефектов в интенсивность КДО мал (рис. 2б).

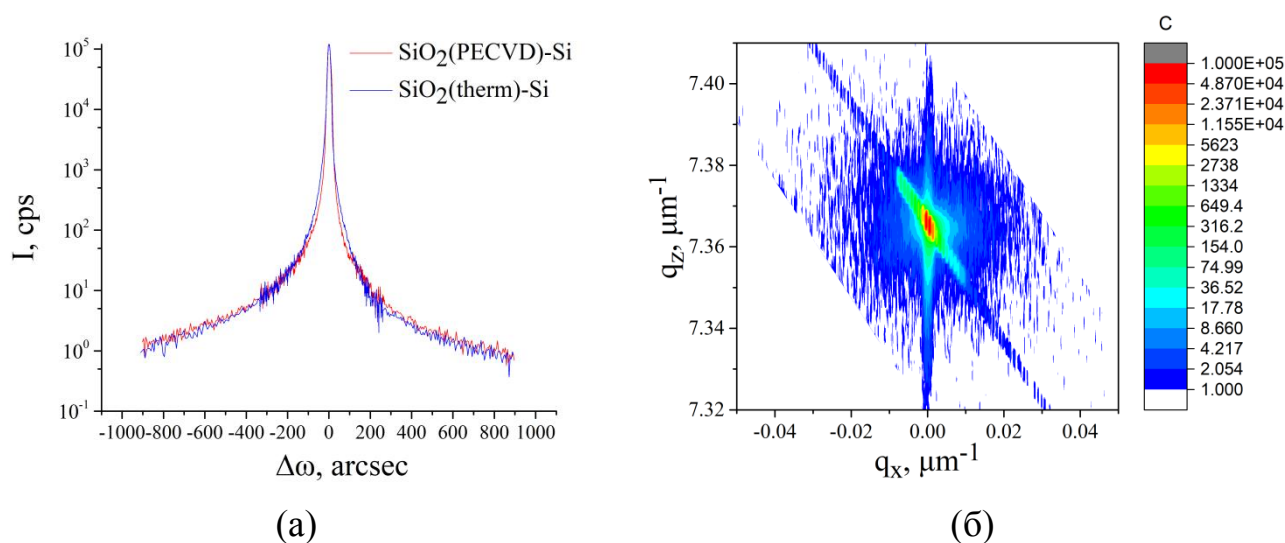


Рисунок 2. Кривая дифракционного отражения (а) и карта обратного пространства (б), измеренные в окрестности узла Si(004) структуры $\text{SiO}_2\text{-Si}$

Используя процедуру, предложенную в [8], проведено сравнение глубинных профилей распределения повреждений в ионно-имплантированных слоях структуры $\text{SiO}_2\text{-Si}$ и монокристалла Si. Положительный знак деформации свидетельствует о пересыщении Si собственными междоузельными атомами, а отрицательный – вакансиями. В отличие от монолитного кристалла Si, где при тех же условиях имплантации наблюдаются пик вакансионных дефектов, в кремниевой решетке структур $\text{SiO}_2\text{-Si}$ сосредоточены исключительно дефекты междоузельного типа (рис. 3). Причем распределение междоузельных атомов в Si структуры $\text{SiO}_2\text{-Si}$ хорошо накладывается на хвост распределения дефектов в монокристалле Si, что подтверждает модельные представления о устойчивом отсечении маской головы профиля первичных радиационных дефектов. Небольшое отклонение от этой зависимости в области межфазной границы связывается со снижением рекомбинационных процессов в этой области, вызванным стоком радиационных вакансий в поверхностную область Si.

Дополнительно распределение дефектов в ионно-имплантированном слое Si структур $\text{SiO}_2(\text{PECVD})\text{-Si}$ и $\text{SiO}_2(\text{терм.})\text{-Si}$, сильно различающихся по значению механических напряжений в приповерхностных слоях Si, анализировалось методом обратного резерфордского рассеяния (RBS).

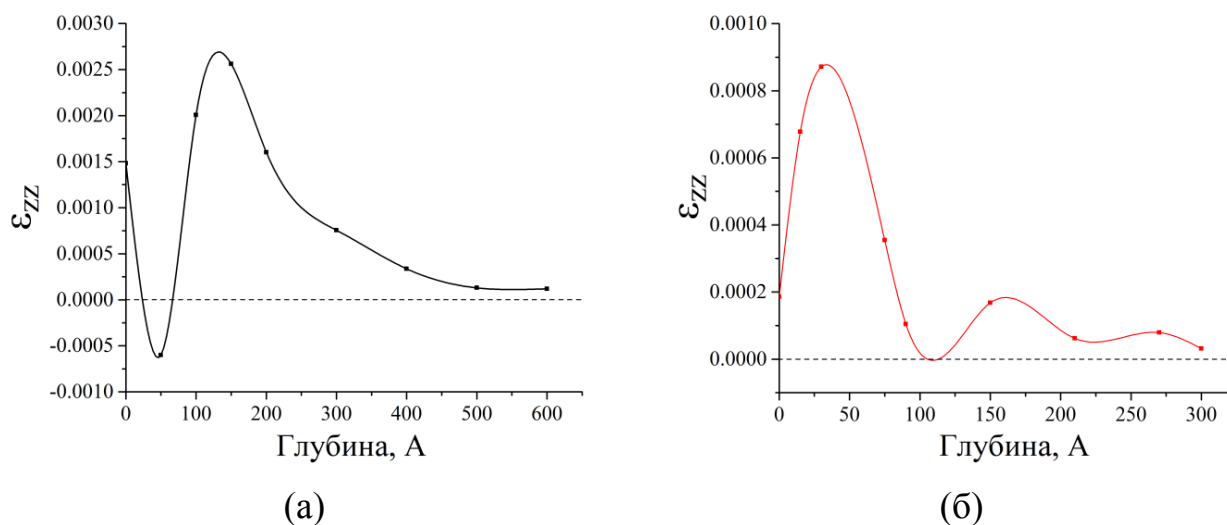


Рисунок 3. Профили распределения деформации по глубине в кремниевой решетке образцов Si (а) и SiO₂-Si (б), облученных Kr⁺ с энергией 40кэВ и дозой 10^{13}см^{-2}

Определение функции концентрации дефектов по глубине проводилось с использованием метода последовательных итераций со ступенчатым приближением вероятности деканалирования по глубине образца на основании методики расчёта, предложенной в [9]. Аналогичный вид хвоста профилей распределения радиационных дефектов в Si фазе структур (рис. 4), облученных ионами Kr⁺, свидетельствует о том, что влиянием упругих полей на характер перераспределения дефектов в области межфазной границы можно пренебречь.

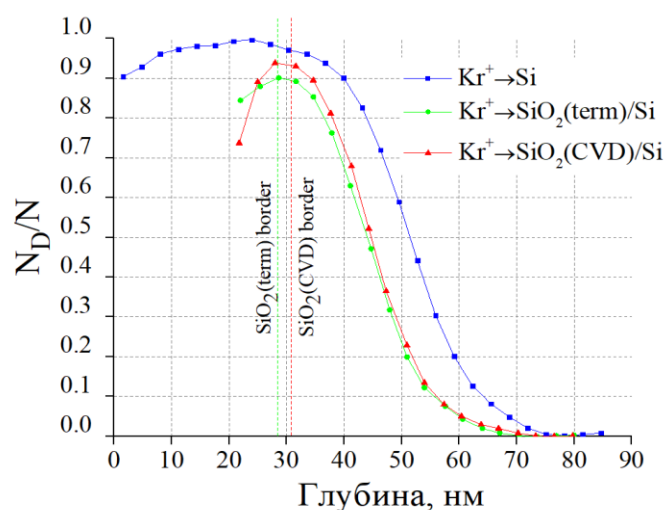


Рисунок 4. Глубинные профили распределения структурных повреждений по данным RBS в образцах Si, SiO₂(PECVD)-Si и SiO₂(терм.)-Si, имплантированных Kr⁺ с энергией 40кэВ и дозой 10^{14}см^{-2}

С целью более основательного изучения роли межфазной границы при облучении тяжелыми ионами методами рентгеновской дифрактометрии был проведен анализ профилей распределения деформации в кремниевой решетке структур $\text{SiO}_2\text{-Si}$, $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$ и TiN-Si (рис. 5). Структуры облучались ионами Kr^+ с энергией 50кэВ и дозой $8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$. При выборе толщины маскирующих слоёв на условие локализации R_p в области границы раздела фаз вводилась поправка, определяющая равенство интегральной концентрации первично рожденных вакансий в объёме Si фазы всех гетероструктур. Это позволяет однозначно связать изменение профиля деформации с изменением концентрации радиационных I в объёме Si. Существенное преобладание положительной деформации в объёме Si, характеризующее пересыщение по I, подтверждает эффект устойчивого интегрального сепарирования радиационных вакансий и междоузлий. Кроме того, идентичный характер профилей деформации во всех образцах позволил подтвердить вывод о том, что взаимодействие межфазной границы с первичными дефектами незначительно, и эффект устойчивого разделения первичных компонент пар Френкеля может быть распространён на другие структуры класса «диэлектрик-Si», удовлетворяющие ранее определённым требованиям в части диффузионной прозрачности фаз для СТД.

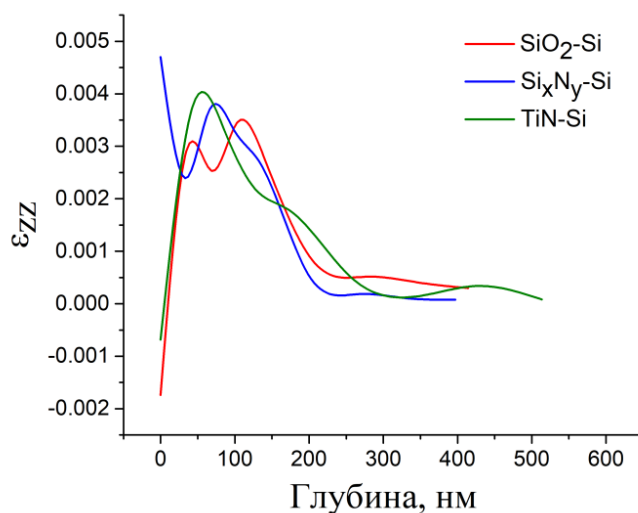


Рисунок 5. Профили распределения деформации по глубине в кремниевой решетке облученных структур $\text{SiO}_2\text{-Si}$, $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$ и TiN-Si

В третьей главе продемонстрирована эффективность управления диффузионными процессами примесных атомов за счет создания нетипового фона радиационных дефектов на примере имплантации в модельных условиях ионов Sb и As в структуру $\text{SiO}_2\text{-Si}$. Впервые показано, что при этом диффузия атомов Sb в Si на стадии постимплантационного отжига может быть

практически полностью подавлена, а диффузия атомов As в Si имеет сложный характер и включает элемент «восходящей диффузии».

Методом вторичной ионной масс-спектропии исследованы особенности диффузионного перераспределения ионов Sb, имплантированных в структуры SiO₂-Si с локализацией R_p на различной глубине в области интерфейса структуры. Имплантация ионов Sb велась с энергией 65кэВ и дозой 10¹³ см⁻², отжиг проводился при температуре 820°C длительностью 15мин. Положение R_p на глубине залегания межфазной границы, а также слева и справа от неё достигалось за счет изменения толщины маски в следующем наборе значений: 18, 31 и 41нм. Аппроксимируя экспериментальные диффузионные профили модельными кривыми, полученными путем решения параметрического уравнения Фика методом конечных разностей, для каждой из структур было определено значение коэффициента диффузии Sb (рис. 6).

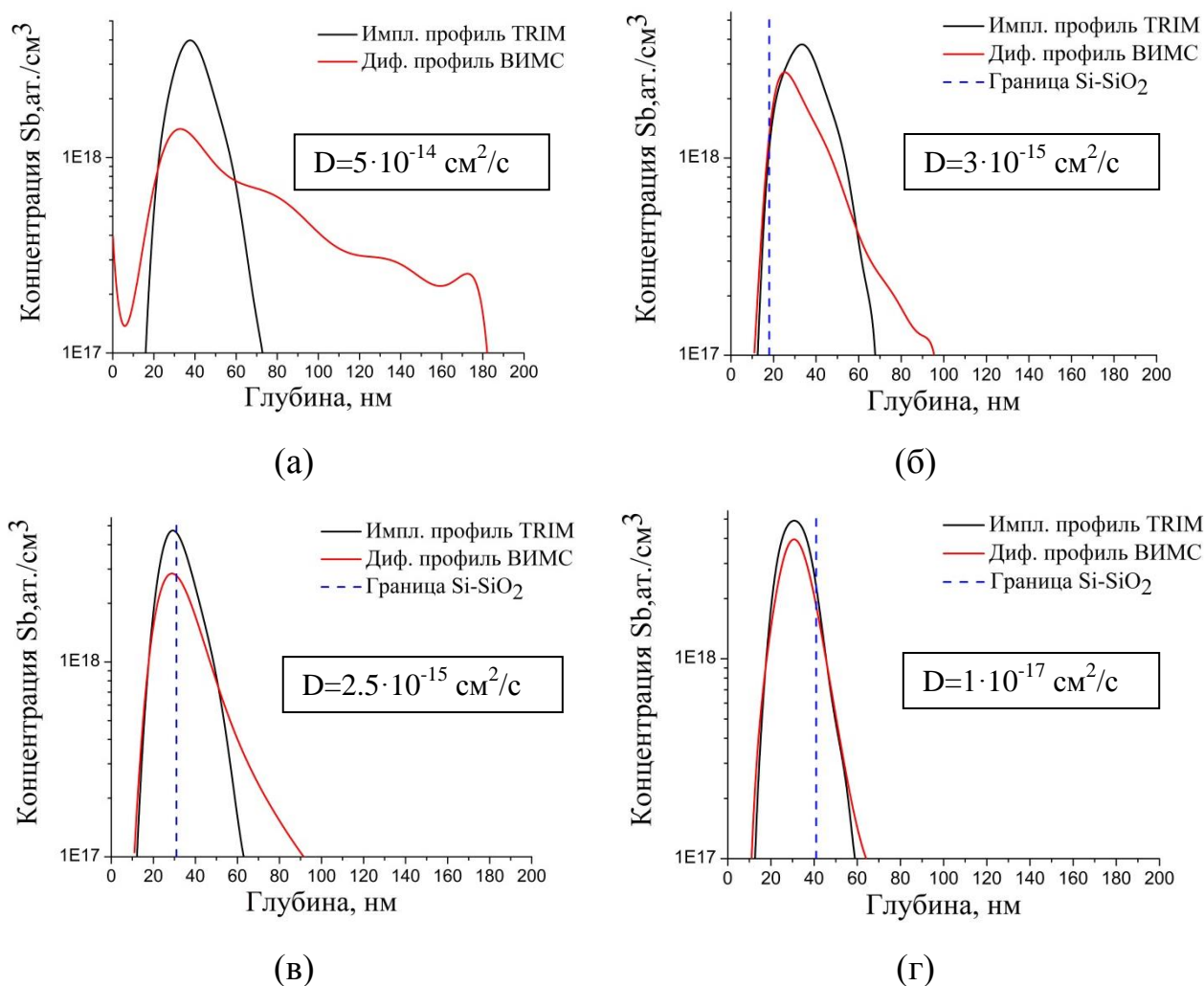


Рисунок 6. Сглаженные диффузионные профили распределения атомов Sb, имплантированных в монокристалл Si (а) и структуры SiO₂-Si при различной толщине маски: 18нм (б), 31нм (в) и 41нм (г)

Обнаружено, что в сравнении с ионной имплантацией сурьмы в голую поверхность кремния имплантация через маску способствует значительному подавлению коэффициента диффузии Sb, имея при этом четкую, но не линейную зависимость от толщины пленки (рис.6). Базируясь на результатах SRIM расчёта профиля первично рождённых вакансий определено, что такое значительное изменение коэффициента диффузии не может быть объяснено только лишь эффектом устойчивого отсечения передней части профиля вакансий, расположенной в маске. Выдвинуто предположение о том, что существенный вклад в изменение скорости диффузии Sb на стадии отжига вносит сток вакансий на границу раздела фаз. Высокую эффективность этого процесса характеризует насыщение значения коэффициента диффузии с уменьшением толщины маски. При больших толщинах маски значение коэффициента диффузии лимитируется интегральной концентрацией запасённых в решетке Si вакансий.

Разработана оригинальная количественная модель диффузионного перераспределения атомов As в составе комплексов с I, имплантированных в границу раздела структуры SiO₂-Si, впервые учитывающая пространственную сепарацию V и I на интерфейсе структуры.

В основе феноменологической модели, объясняющей эффект нетипичного диффузионного перераспределения As, лежат положения о пространственном отсечении радиационных вакансий в слое SiO₂ и массопереносе As в составе парного комплекса As-I (рис. 7). Допуская, что максимум распределения I в составе радиационных дефектов локализован на 20% глубже R_p, во время отжига при распаде радиационно-термических дефектов с испусканием I будет обеспечен разнонаправленный диффузионный поток I и связанные с ним потоки пар As-I. Причем один из потоков As-I будет направлен к поверхности слоя Si, а другой – вглубь кристалла. Это будет приводить к деформации ионно-имплантированного профиля As за счет увеличения концентрации As у поверхности и «на хвосте» профиля, а также «провала» распределения в области максимума произведения концентраций As и радиационно-термических дефектов I-типа. Модельные расчеты адекватно описывают эксперимент и, в отличие от моделей-аналогов, не требуют для описания экспериментальных фактов привлечения эффектов сегрегации примеси на границе раздела Si-SiO₂.

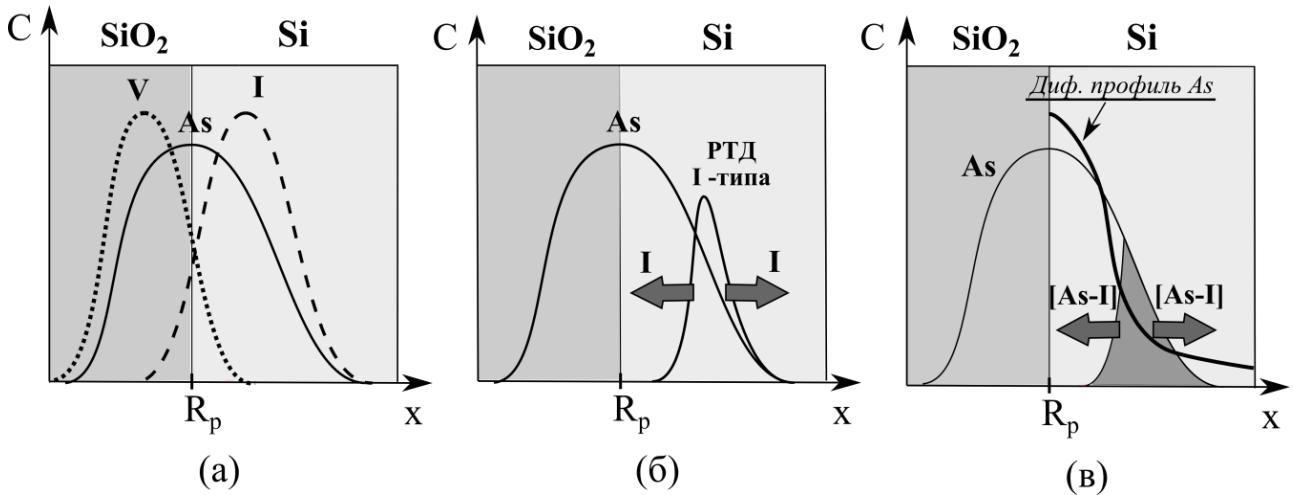


Рисунок 7. Модельные представления диффузионного перераспределения As: сепарирование V и I в фазах структуры SiO₂-Si (а), формирование двух разнонаправленных потоков I в результате распада радиационно-термических дефектов (б), деформация профиля As, обусловленная диффузионными потоками пар [As-I] (в)

Разработанная количественная модель перераспределения As описывается системой трех связанных реакционно-кинетических уравнений, определяющих эволюцию собственных междуузельных атомов Si (I), атомов примеси в положении замещения (As) и в междуузельном положении (As_i):

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{As_i}}{\partial t} = D_{As_i-I} \frac{\partial^2 C_{As_i-I}}{\partial x^2} + \sigma C_{As} C_I \\ \frac{\partial C_{As}}{\partial t} = -\sigma C_{As} C_I \\ \frac{\partial C_I}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2 C_I}{\partial x^2} + (D_{As_i-I} - D_I) \frac{\partial^2 C_{As_i-I}}{\partial x^2} - \sigma C_{As} C_I + G(x, T) \end{cases} \quad (1)$$

где σ – сечение взаимодействия компонентов реакции Воткинса, $G(x, T)$ – скорость пополнения раствора собственных междуузельных атомов, которая определяется распределением и скоростью распада радиационно-термических дефектов, D_I – коэффициент диффузии собственных междуузельных атомов Si, D_{As_i-I} – коэффициент диффузии комплекса As-I.

Верификация модельных представлений проводилась путем численного расчета профиля распределения As в структуре SiO₂-Si на стадии постимплантационного отжига в соответствии с параметрами эксперимента, поставленного в работе [10]. Результаты расчета и экспериментальные профили As представлены на рис. 8.

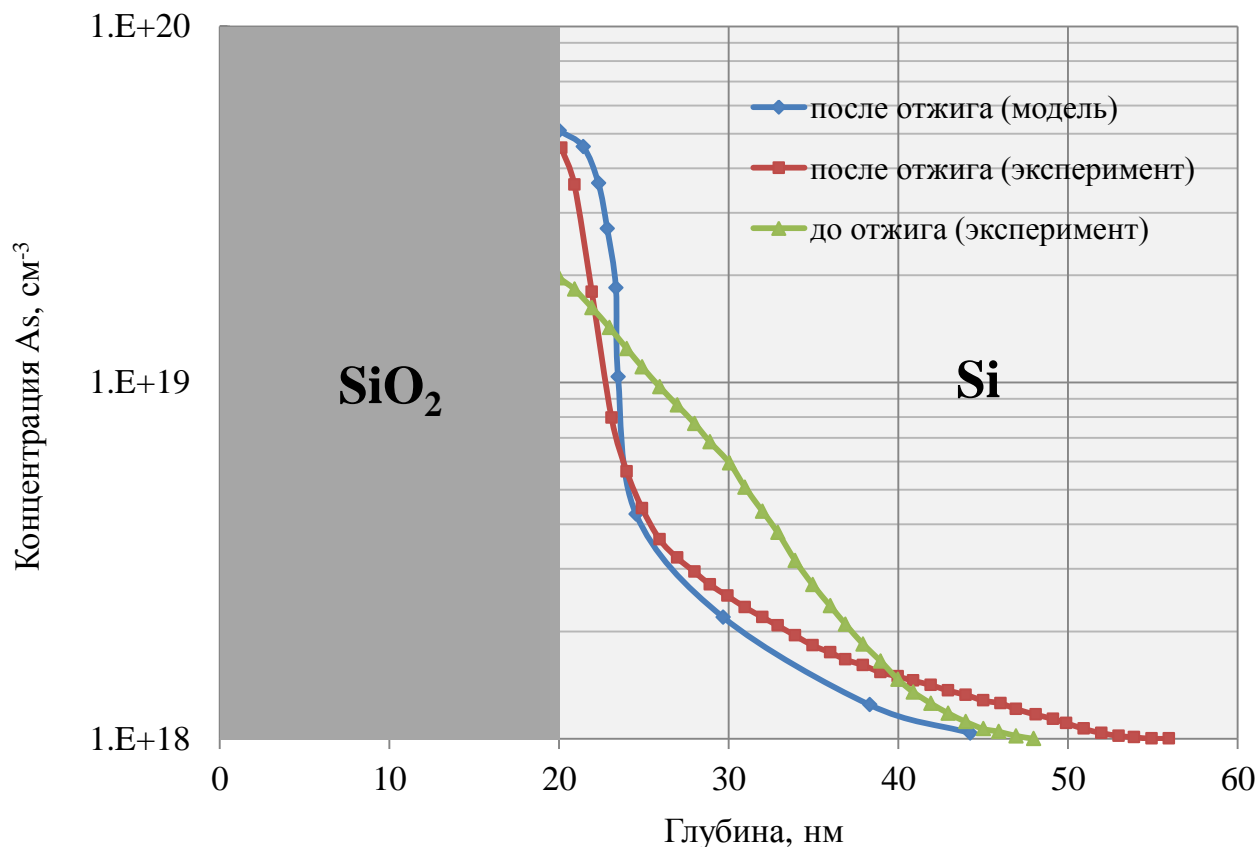


Рисунок 8. Сопоставление расчетного диффузионного профиля As с экспериментальным по данным [10]

Построенная модель качественно и количественно описывает эффект накопления As в приповерхностных слоях Si. На основании рассчитанного значения коэффициента диффузии мышьяка ($3 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$) определено, что во время протекания диффузионных процессов пересыщение кремния по собственным междоузельным атомам составляло порядка $1.5 \cdot 10^3$. Кроме того, в предположении, что основным типом радиационно-термических дефектов, испускающих I, являлись дислокационные петли, определено, что их концентрация составляла $7.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Четвертая глава посвящена теоретическим исследованиям эффектов управления ионно-имплантированным профилем примесных атомов при формировании мелкозалегающих локальных ионно-легированных областей в Si под воздействием электрических и механических полей. Такие эффекты неизбежно возникают при имплантации кремния через вскрытое в маскирующем слое окно и при малых размерах окна могут оказывать существенное влияние на формирование всей ионно-имплантированной области посредством дрейфовых потоков дефектов, приводя к практически значимой коррекции её естественного диффузионного размытия. В главе

определены критические размеры мелкозалегающих ионно-имплантированных областей, при которых существенное влияние на их формирование в части коррекции металлургической границы будут оказывать механические и электрические поля, связанные с присутствием маскирующего слоя.

Основываясь на литературных данных [11] о величине встроенного электростатического заряда, возникающего в слое SiO_2 при имплантации в него ионов, методами компьютерного моделирования в среде TCAD Sentaurus получены расчеты 2D распределения электрических полей в Si в области вскрытого окна в маске. Моделировался процесс ионной имплантации As^+ с энергией 20 кэВ и дозой 10^{16} см^{-2} в топологическую структуру $\text{SiO}_2\text{-Si}$ с толщиной маски 60 нм в диапазоне размера окон 22 – 180 нм. Обнаружено, что максимальные значения электростатических полей наблюдается непосредственно в области целенаправленного введения примесных атомов, достигая значений $\sim 10^3 - 10^4 \text{ В/см}$ (рис. 9). Причём с уменьшением ширины окна от 180 нм до 22 нм в различных точках формируемой области изменение напряженности поля достигает 17 раз, что неизбежно ведет к изменению протекания различных радиационных процессов и, в итоге, профиля распределения примеси.

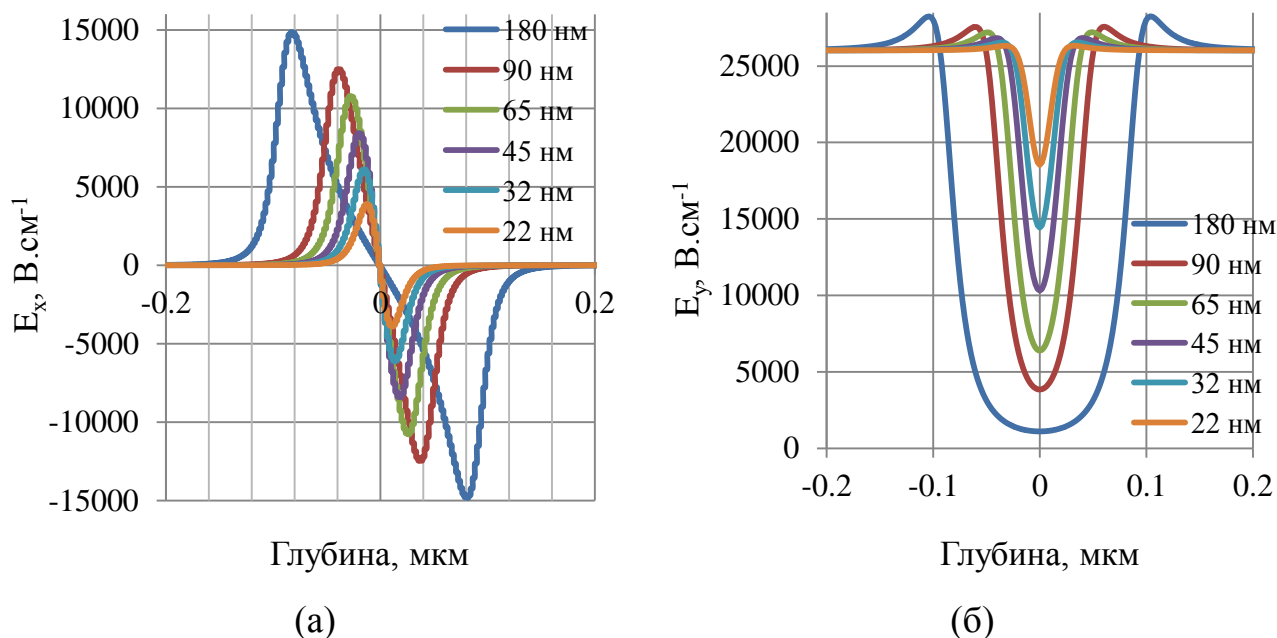


Рисунок 9. Распределение горизонтальной (а) и вертикальной (б) составляющих электростатических полей в Si в области вскрытого окна маски на глубине среднего проецированного пробега ионов

Рассматривая случай малых доз имплантации, когда концентрация заряженных радиационных дефектов ещё определяется исходным положением уровня Ферми в Si, определено, что максимальные концентрации заряженных

дефектов, а, следовательно, и дрейфовые потоки будут наблюдаться в кремнии следующих спецификаций: КДБ-0.002 (преобладание V^+), КДБ-0.05 (преобладание V^{++}) и КЭФ-0.01 (преобладание V^-).

Кроме того, обсуждается появление тангенциальных и изменение нормальных механических полей в Si вследствие вскрытия окна в исходно напряженной маске. Определено, что нормальные составляющие полей имеют свойство разделяться по знаку напряжений на границе края маски, приводя к формированию разнонаправленных дрейфовых потоков радиационных I и V.

Критерием значимого вклада дрейфовых потоков в коррекцию границ ионно-имплантированной области принято достижение ими 10% от величины диффузионного:

$$\frac{j_{эл}}{j_{диф}} = \frac{DnE}{\frac{kT}{e} D \frac{dn}{dx}} = 10\% , \quad (2)$$

$$\frac{j_{мех}}{j_{диф}} = \frac{Dn}{D \frac{dn}{dx} f k T} \omega \nabla \sigma = 10\% , \quad (3)$$

где E – напряженность эл. поля, $\nabla \sigma$ - градиент механического поля, f – фактор корреляции, учитывающий возможность дефекта совершить обратный скачок (для Si равен 0.781), n – полная концентрация дефектов, а D – их коэффициент диффузии.

Пользуясь предложенным критерием (2) установлено, что практически значимая коррекция глубины залегания области за счет действия электрического поля достигается при размере окна 45нм и усиливается по мере его уменьшения. Коррекция боковых границ ионно-имплантированной области наоборот существенна при большой ширине окна и проявляется вплоть до значения 65нм.

Область распространения градиентов упругих полей в латеральном направлении является весьма протяженной и составляет от 2 до 3,5 мкм. Другими словами, краевые упругие поля будут полностью заполнять ионно-имплантированную область при имплантации даже в окна шириной 4–7 мкм. Максимум градиента напряжений при этом достигается непосредственно вблизи края маски, и отношение $j_{мех}/j_{диф}$ в этой области превышает 1000%. Вероятно такая картина будет наблюдаться до тех пор, пока сток точечных дефектов не приведёт к релаксации источников напряжений в силу известного эффекта малых доз.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложен и обоснован новый подход к термически устойчивому интегральному разделению компонентов пар Френкеля, возникающих при ионной имплантации в слоистые гетерогенные структуры на основе Si. Для двухслойных структур условиями достижения эффекта являются локализация среднего проецированного пробега внедряемых ионов в области межфазной границы и различная диффузионная прозрачность фаз для точечных дефектов.
2. Экспериментально подтверждено, что имплантация тяжелых инертных ионов в SiO₂-Si, TiN-Si и Si₃N₄-Si при модельно заданных условиях создает несвойственное радиационным воздействиям многократное пересыщение слоев Si собственными междоузлиями.
3. Обнаружено, что в сравнении с ионной имплантацией Sb в голую поверхность кремния имплантация через маску способствует значительному подавлению коэффициента диффузии Sb. В том случае, когда толщина маски на 30% больше среднего проецированного пробега внедряемых ионов, коэффициент диффузии Sb подавляется в $5 \cdot 10^3$ раз, практически совпадая со своим термодинамически равновесным значением.
4. Разработана оригинальная количественная модель сложного диффузионного перераспределения атомов As, имплантированных в границу раздела структуры SiO₂-Si, впервые учитывающая особенности сформированного в таких условиях первичного фона радиационных дефектов. Предложенная модель в отличие от моделей-аналогов не требует для описания экспериментальных фактов привлечения эффектов сегрегации примеси на границе раздела Si-SiO₂.
5. Определены критические размеры мелкозалегающих ионно-имплантированных областей, при которых существенное влияние на формирование областей в части коррекции их границы будут оказывать механические и электрические поля, порождаемые маскирующим слоем.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Баранов, Г.В. Особенности перераспределения атомов As в Si при ионной имплантации структур SiO₂-Si / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, Ш.Г. Песков // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2017. – №.2. – С.4-10.
2. Баранов, Г.В. Эффект разделения компонентов пар Френкеля при ионной имплантации структур SiO₂-Si / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, К.Д. Щербачев // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2018. – №.3. – С. 23-28.

3. Баранов, Г.В. Физические особенности формирования локальных субмикронных ионно-имплантированных областей / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, Н.Н. Герасименко, А.В. Селецкий // Наноиндустрия. – 2018. – №. 6. – С. 426-433.
4. Баранов, Г.В. Перераспределение имплантированного As в условиях диффузии, стимулированной радиационными дефектами / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, О.М. Орлов // Тезисы докладов IV Всероссийской конференции "Физические и физико-химические основы ионной имплантации". – Новосибирск, 2012. – С. 30
5. Баранов, Г.В. Особенности формирования мелких ионно-имплантированных As слоев в структуре Si/SiO₂ / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, О.М. Орлов // Труды 55-й научной конференции МФТИ. – Долгопрудный, 2012. – С. 47-48.
6. Баранов, Г.В. Физические особенности формирования субмикронных ионно-легированных областей / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев // Труды 56-й научной конференции МФТИ. – Долгопрудный, 2013. – С. 43-45.
7. Баранов, Г.В. Особенности радиационно-стимулированной диффузии As в структуре SiO₂/Si / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, О.М. Орлов, Ш.Г. Песков // Тезисы докладов конференции «Кремний-2014». – Иркутск, 2014. – С. 76.
8. Баранов, Г.В. Особенности формирования наноразмерных ионно-легированных областей / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, А.В. Селецкий // Тезисы докладов V Всероссийской конференции "Физические и физико-химические основы ионной имплантации". – Нижний Новгород, 2014. – С.23-24.
9. Baranov, G.V. The effect of Frenkel pairs components separation during ion implantation into SiO₂-Si structure / G.V. Baranov // Proceedings of the 26th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology". – Minsk, 2018. – P. 146.

Список используемых источников:

1. Orłowski, M. New model for dopant redistribution at interfaces / M. Orłowski // Appl. Phys. Lett. – 1989. – V. 55. – N.17 – P. 1762-1764.
2. Dabrowski, J. Mechanism of dopant segregation to SiO₂/Si (001) interfaces / J. Dabrowski, H.-J. Müssig, V. Zavodinsky, R. Baierle, M. J. Caldas // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – N. 24. – P. 245305.
3. Kawai, H. Density-functional study on the dopant-segregation mechanism: Chemical potential dependence of dopant-defect complex at Si/SiO₂ interface / H.

- Kawai, Y. Nakasaki, T. Kanemura, T. Ishihara // J. Appl. Phys. – 2018. – V. 123. – N. 16. – P. 161425.
4. Герасименко, Н.Н. Структура и люминесценция кремния, облученного протонами / Н.Н. Герасименко, А.Н. Михайлов, В.В. Козловский, О.А. Запорожан, Н.А. Медетов, Д.И. Смирнов, Д.А. Павлов, А.И. Бобров // Перспективные материалы. – 2013. – №. 8. – С. 18-23.
 5. Соболев, Н.А. Фотолюминесценция в кремнии, имплантированном ионами эрбия при повышенной температуре / Н.А. Соболев, А.Е. Калядин, И.Е. Шек, В.И. Сахаров, И.Т. Серенков, В.И. Вдовин, Е.О. Паршин, М.И. Маковийчук // ФТП. – 2011. – Т. 45. – №. 8. – С. 1038-1040.
 6. Королев, Д.С. Формирование гексагональной фазы кремния 9R при ионной имплантации / Д.С. Королев, А.А. Никольская, Н.О. Кривулин, А.И. Белов, А.Н. Михайлов, Д.А. Павлов, Д.И. Тетельбаум, Н.А. Соболев, М. Kumar // Письма в ЖТФ. – 2017. – Т. 43. – №. 16. – С. 87-92.
 7. Italyantsev, A.G. Solid-phase reaction on silicon surface. Accompanying processes / A.G. Italyantsev // J. Appl. Phys. – 1996. – V. 79. – N. 5. – P. 2369-2375.
 8. Щербачев, К.Д. Применение трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии для исследования ионоимплантированных слоев / К.Д. Щербачев, А.В. Курипятник, В.Т. Бублик // Заводская лаборатория. - 2003. - № 6. - С. 23-31.
 9. Комаров, Ф.Ф. Неразрушающий анализ поверхностей твёрдых тел ионными пучками / Ф.Ф. Комаров, М.А. Кумахов, И.С. Ташлыков. – Минск: изд-во «Университетское», 1987. – 256 с.
 10. Кибалов, Д.С. Анализ сверхтонких слоев имплантации мышьяка в кремнии методом вторично-ионной масс-спектрометрии / Д.С. Кибалов, О.М. Орлов, С.Г. Симакин, В.К. Смирнов // Письма в ЖТФ. – 2004. – Т. 30, №.21. – С. 21-26.
 11. Mescheder, U. Properties of SiO₂ electret films charged by ion implantation for MEMS-based energy harvesting systems / U. Mescheder, B. Müller, S. Baborie, P. Urbanovic // J. Micromech. Microeng. – 2009. – V. 19. – N. 9. – P. 094003.