

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»

*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 –

твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,  
микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук,  
Итальянцев А.Г.

Москва 2018 г.

## Содержание

Введение .....	5
<b>Глава I. Радиационные дефекты и диффузия примесей в условиях пересыщенных растворов вакансий и междоузлий.....</b>	<b>14</b>
1.1. Пересыщенные растворы ТД радиационного происхождения.....	14
1.1.1. Общие положения образования первичных пар Френкеля в Si .....	15
1.1.2. Пространственное распределение первичных дефектов при ионной имплантации .....	18
1.1.3. Вторичные радиационно-термические дефекты.....	25
1.1.4. Характер взаимодействия подвижных точечных дефектов с межфазными границами .....	26
1.2. Диффузия, стимулированная неравновесными дефектами .....	28
1.2.1. Механизмы диффузии примесных атомов с участием ТД .....	29
1.2.2. Диффузия, ускоренная ТД радиационного происхождения.....	31
1.2.3. Эффект Воткинса.....	33
1.2.4. Эффект вакансионного и междоузельного ветра.....	35
1.2.5. Сегрегация примесных атомов на межфазных границах.....	36
1.2.6. Диффузия, стимулированная электрическим полем.....	37
1.2.7. Диффузия в механических полях .....	39
1.3. Прикладные задачи стимулированной диффузии.....	40
1.4. Выводы к главе 1 .....	43
<b>Глава II. Эффект устойчивого интегрального пространственного разделения радиационных компонент пар Френкеля в слоистых гетероструктурах.....</b>	<b>45</b>
2.1. Феноменология эффекта на границах раздела гетероструктур .....	45
2.1.1. Качественное распределение вакансий и междоузлий в ионно-имплантированных гетероструктурах.....	46
2.1.2. Расчет параметров имплантации для достижения эффекта разделения V и I в двухслойных структурах на основе Si .....	48
2.2. Экспериментальные исследования эффекта в структуре SiO <sub>2</sub> -Si .....	52

2.2.1. Экспериментальные и контрольные структуры .....	52
2.2.2. Исследование профилей распределения деформации решетки кремния методами рентгеновской дифрактометрии.....	54
2.2.3. Анализ распределений радиационных дефектов методом RBS .....	60
2.3. Экспериментальные исследования эффекта устойчивого разделения пар Френкеля в гетероструктурах $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$ и $\text{TiN-Si}$ .....	70
2.3.1. Модельное определение параметров эксперимента.....	70
2.3.2. Исследование профилей распределения деформации решетки кремния методами рентгеновской дифрактометрии.....	72
2.4. Выводы к главе 2.....	78
<b>Глава III. Эффекты диффузии примесных атомов в условиях пространственно дифференцированных распределений ТД в слоистых структурах.....</b>	<b>80</b>
3.1. Модельные представления о диффузии примеси, имплантированной в структуру «диэлектрик – Si» в условиях пространственного сепарирования радиационных ТД.....	80
3.2. Диффузия атомов сурьмы и мышьяка, имплантированных в Si через пленку $\text{SiO}_2$ .....	82
3.2.1. Исследование особенностей диффузионного перераспределения Sb ..	83
3.2.2. Математическая модель диффузионного перераспределения As.....	89
3.2.3. Сопоставление теоретического и экспериментального диффузионных профилей распределения As .....	96
3.3. Выводы к главе 3 .....	98
<b>Глава IV. Особенности процессов при ионной имплантации в окна масочных покрытий нанометрового диапазона .....</b>	<b>101</b>
4.1. Эффекты диффузии в электрических полях, индуцированных накоплением заряда в маске .....	102
4.2. Эффекты диффузии в механических полях, обусловленных вскрытием окна в маске .....	108

4.3. Эффекты распыления атомов маски и их контаминация в ионно-имплантированной области.....	113
4.4. Выводы к главе 4 .....	115
Основные результаты работы и выводы.....	118
Список используемых сокращений.....	120
Список работ, опубликованных по теме диссертации .....	122
Список цитируемой литературы.....	124

## ВВЕДЕНИЕ

### 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  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ ,  $\text{TiN-Si}$  и  $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$  структур методами обратного резерфордовского 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  $\text{SiO}_2$ , TiN,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  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  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ . 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».

4. Разработана оригинальная количественная модель диффузионного перераспределения атомов As в составе комплексов с I, имплантированных в границу раздела структуры  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , 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-SiO<sub>2</sub>.

### **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 SiO<sub>2</sub>-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 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 SiO<sub>2</sub>-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 опубликованы 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 резерфордовского 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 сокращений, введение, четыре главы, заключение, список работ, опубликованных по теме диссертации, список цитируемой литературы из 82 наименований и содержит 132 страницы, в том числе 51 рисунок и 3 таблицы.

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

**В первой главе** представлен аналитический обзор литературных материалов по теме диссертационных исследований, поставлены основные задачи работы. В обзоре подробно обсуждаются процессы радиационного дефектообразования и диффузии примесных атомов в Si в условиях пересыщенного твердого раствора собственных точечных дефектов (СТД) радиационного происхождения. Рассмотрены прикладные задачи стимулированной диффузии примесных атомов, а также вторичного радиационно-термического дефектообразования в Si.

**Вторая глава** посвящена теоретическим и экспериментальным исследованиям особенностей распределения компонентов первичных радиационных пар Френкеля в окрестности межфазных границ облученных слоистых структур на основе Si. Предложены и экспериментально подтверждены принципы реализации устойчивого интегрального разделения компонент радиационных пар Френкеля на границе раздела фаз гетероструктур, позволяющие создать уникальную для радиационной физики ситуацию качественного изменения соотношения концентраций, запасенных в объёме кремния, I и V в области формирования профиля примесных атомов.

**Третья глава** посвящена теоретическим и экспериментальным исследованиям специфики диффузионного перераспределения примесных атомов,

обусловленной особенностями распределения компонентов первичных радиационных пар Френкеля в слоистых структурах на основе Si. Детально обсуждаются эффекты диффузии атомов Sb и As, имплантированных в структуру SiO<sub>2</sub>-Si, представлены соответствующие экспериментальные данные.

**В четвертой главе** приведены результаты теоретических исследований эффектов управления ионно-имплантированным профилем примесных атомов при формировании мелко-залегающих малых планарных ионно-легированных областей в Si под действием электрических и механических полей, связанных с присутствием маскирующего слоя.

**В заключении** обобщаются результаты диссертационной работы и сформулированы основные выводы.

## **ГЛАВА I. РАДИАЦИОННЫЕ ДЕФЕКТЫ И ДИФФУЗИЯ ПРИМЕСЕЙ В УСЛОВИЯХ ПЕРЕСЫЩЕННЫХ РАСТВОРОВ ВАКАНСИЙ И МЕЖДОУЗЛИЙ**

В главе представлен аналитический обзор 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.

### **1.1. Пересыщенные растворы ТД радиационного происхождения**

Процесс внедрения ионов в твердое тело всегда сопровождается генерацией неравновесных дефектов. Причем на различных временных интервалах процесса генерации первичный дефектный фон претерпевает значительные изменения, обусловленные накоплением, диффузионным перемешиванием и взаимодействием дефектов, приводя в конечном итоге к образованию стабильных комплексов. С целью улучшения электрических характеристик приборных структур по окончании процесса ионной имплантации всегда проводится термический отжиг. Связанные с отжигом вторичные процессы эволюции дефектного фона в значительной степени и ответственны за эффекты диффузии примесных атомов. Но поскольку вторичные процессы определяются остаточным первичным дефектным фоном, то первичные процессы дефектообразования заслуживают особо тщательного анализа.

### 1.1.1. Общие положения образования первичных пар Френкеля в Si

Простейшими структурными дефектами, порождаемыми радиационным воздействием, являются вакансии и собственный междоузельным атом подложки (пара Френкеля), образующиеся в результате упругого взаимодействия налетающей частицы с атомом подложки.

Образование пары Френкеля связано с понятием пороговой энергии дефектообразования  $E_d$ . Пороговой энергией называют наименьшую величину энергии, которую необходимо передать одному из атомов решетки кристалла, для того чтобы он оказался в ближайшем междоузельном положении. В отношении к основному материалу микроэлектроники – кремнию, принято считать, что значение пороговой энергии составляет порядка 20эВ [8].

В процессе взаимодействия внедряемой частицы с подложкой первично выбитому атому подложки может быть передана энергия, превышающая  $E_d$ . В этом случае такой атом способен сам образовать одну или несколько пар Френкеля, приводя, таким образом, к формированию целого каскада столкновений. Атомы отдачи, обладающие энергией, достаточной для разделения с вакансией на несколько постоянных решетки, имеют высокую вероятность избежать прямой аннигиляции и стать независимыми [8]. В связи с этим принято различать близкие (неустойчивые) и дальние (устойчивые) пары Френкеля.

Различная картина генерации ТД наблюдается в ситуациях с легкими и тяжелыми внедряемыми частицами (рис. 1.1). Поскольку тяжелые ионы в отличие от легких способны передать атомам подложки больше энергии в упругих соударениях, то количество создаваемых дефектов в этом случае будет существенно больше, а их концентрация выше. Поскольку интенсивность процессов образования комплексов первичных дефектов определяется их концентрацией, считается, что имплантация легких ионов приводит к образованию преимущественно точечных дефектов, а имплантация тяжелых ионов вызывает образование плотной связанной разупорядоченной области.

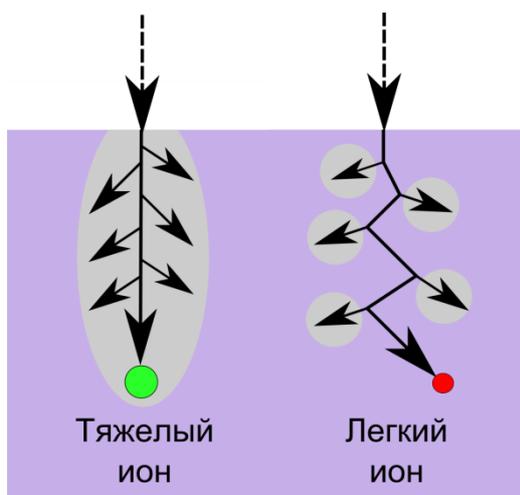


Рисунок 1.1. Схематичное изображение особенностей образования радиационных дефектов при имплантации легких и тяжелых ионов

Количественной характеристикой процессов первичного дефектообразования служит число смещенных атомов решетки кремния на один внедренный ион. В области малых значений энергии, когда энергетические потери преимущественно идут на упругие соударения, число смещенных атомов подложки можно рассчитать по формуле Кинчина-Пиза:

$$N = \frac{E}{2E_d} \quad (1.1)$$

При более высоких энергиях, когда становится высока доля расхода кинетической энергии иона на неупругие соударения, может быть сделана следующая оценка [9]:

$$N = \frac{10^{-3}(E - E_c) + \frac{1}{2}E_c}{E_d} \quad (1.2)$$

где  $E_c$  – энергия внедряемой частицы, при которой равноценны доли потерь на упругие и неупругие соударения.

В табл. 1.1 представлены результаты расчёта числа дефектов в соответствии с формулами (1.1) и (1.2) для основных типов ионов, используемых в технологии кремниевой микроэлектроники.

Таблица 1.1. Совокупное число смещенных атомов подложки кремния при имплантации основных типов ионов в диапазоне энергий 10-60кэВ

Тип иона	Значение энергии ионов		
	10кэВ	30 кэВ	60кэВ
Бор	200	211	226
Неон	250	750	1251
Фосфор	250	750	1500
Аргон	250	750	1500
Мышьяк	250	750	1500
Криптон	250	750	1500

Пояснения к результатам вычислений: значение энергии  $E_c$  получено с использованием программной среды SRIM, результатам расчёта которой в части потерь энергии можно доверять (см., например, [10]).

Результаты расчета показывают, что в диапазоне энергий 10-60 кэВ, начиная с фосфора в область увеличения массы иона, количество смещенных атомов подложки не зависит от массы иона. В ситуации с легкими ионами бора количество созданных дефектов имеет слабую зависимость от энергии иона.

После внедрения ионов происходит термализация дефектной области, в основе которой лежат процессы комплексообразования и спонтанной аннигиляции компонент пар Френкеля. В результате чего запасенное количество дефектов после ионной имплантации значительно отличается от рассчитанных выше значений. Для грубой оценки числа запасенных дефектов используется (+1)-модель, справедливая для малых доз имплантации ( $<10^{14}$  см<sup>-2</sup>). Модель базируется на предположении, что большая часть вакансий рекомбинирует с собственными междоузельными атомами непосредственно при облучении и частично расходуется на активацию легирующей примеси, в результате чего на каждый имплантированный ион остается один лишний I [11]. В [12] отмечается,

что повышение дозы имплантации приводит к сильному отклонению от (+1)-модели до (+4.5). Высказывается предположение, что более вероятным механизмом такого отклонения служит усиление стока вакансий на поверхность.

### **1.1.2. Пространственное распределение первичных дефектов при ионной имплантации**

Первичные радиационные дефекты формируются по всей глубине имплантации, однако плотность их распределения неоднородна. Причиной тому служит как исходный пространственный сдвиг  $I$  относительно  $V$ , обусловленный остаточной кинетической энергией  $I$ , так и дальнейшие процессы диффузионной миграции и аннигиляции компонентов пар Френкеля.

Чтобы прояснить причину первичного пространственного сдвига в распределениях  $I$  и  $V$  следует рассмотреть задачу о центральном упругом ударе движущейся частицы о покоящуюся. Такая простая физическая аналогия в определенной степени соответствует схеме взаимодействия имплантированного иона с атомом подложки, находящимся в узле кристаллической решетки.

В зависимости от соотношения масс взаимодействующих частиц будет наблюдаться различная картина их пространственного расположения после акта соударения. Используя законы классической динамики, легко показать, что когда масса налетающей частицы ( $m_1$ ) превосходит массу покоящейся ( $m_2$ ) после их упругого взаимодействия налетающий шар продолжит движение в направлении своего первоначального движения, а в ситуации  $m_1 < m_2$  – изменит направление движения на противоположное. При условии, что шары двигаются в поле внешних противодействующих их движению сил, конечное расположение шаров после энергетического размена всей их кинетической энергии будет соответствовать ситуации представленной на рис. 1.2. Применительно к ионной имплантации в кремний, ситуация  $m_1 < m_2$  соответствует внедрению таких легких ионов, как В и Ne, а ситуация  $m_1 > m_2$  – P, Ar, As и Kr.

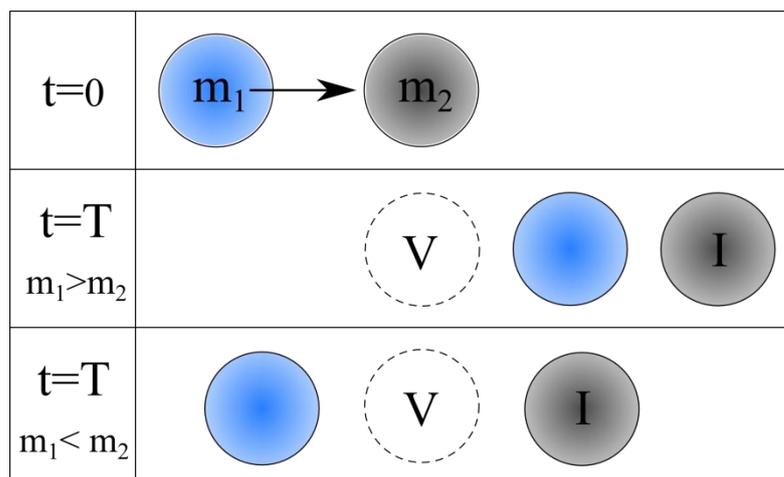


Рисунок 1.2. Качественная картина пространственного расположения налетающей ( $m_1$ ) и покоящейся ( $m_2$ ) частиц после их упругого взаимодействия и полной диссипации кинетической энергии

Смещение покоящейся частицы после акта упругого соударения в нашей схеме иллюстрирует эффект пространственного разделения вакансии (первоначальное местоположение частицы) и собственного междоузельного атома подложки (конечное положение частицы). Длина такого пространственного смещения, или разделения V и I, определяется скоростью сообщенной частице  $m_2$  в результате столкновения:

$$V_2 = V_1 \frac{2}{1 + \frac{m_2}{m_1}}, \quad (1.3)$$

где  $V_1$  – скорость движения частицы  $m_1$  перед моментом столкновения. Таким образом, пространственное разделение V и I будет усиливаться не только с увеличением энергетике налетающей частицы, но и с увеличением её массы.

Модель абсолютно упругого центрального удара качественно описывает характер конечных распределений взаимодействующих атомов. Однако наиболее вероятна ситуация не центрального упругого столкновения, а упругого рассеяния. Закономерности распределений атомов в целом от этого не должны поменяться, поскольку проекции всех импульсов на направление движения налетающей частицы не изменятся. Однако скалярное значение проекций в этом случае будет

ниже, в связи с чем следует ожидать менее выраженного эффекта разделения в направлении внедрения ионов.

Исходно разделение радиационных I и V обусловлено остаточной кинетической энергией атомов отдачи матрицы кристалла, которые успевают переместиться на некоторое расстояние в направлении имплантации, прежде чем останавливаются. Как будет показано далее, разделение первичных дефектов без учёта спонтанных и термически активированных процессов не слишком велико и составляет порядка единиц % от значения среднего проецированного пробега внедряемых ионов ( $R_p$ ). Существенная деформация профилей генерации первичных дефектов, происходит за счёт рекомбинационных процессов, интенсивно протекающих в области пересечения профилей I и V, что способствует усилению их пространственного разделения (рис. 1).

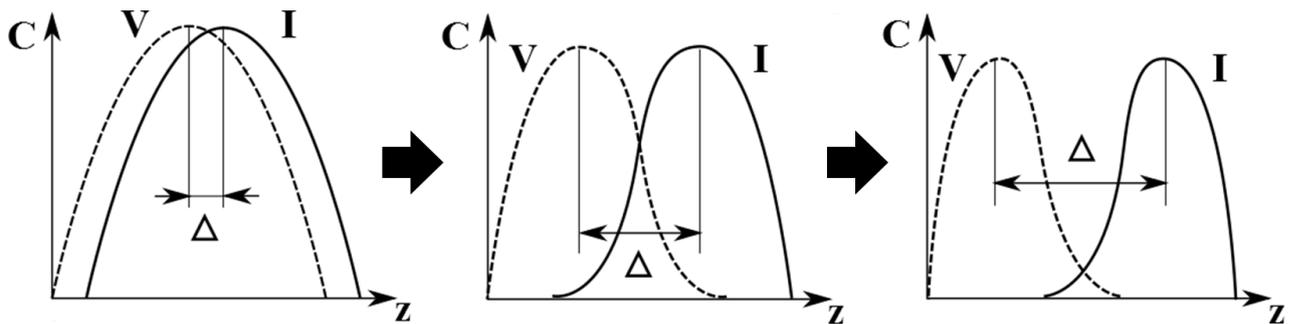


Рисунок 1.3. Схематическое изображение динамики деформации профилей распределения первичных радиационных дефектов по мере протекания рекомбинационных процессов и сопутствующее им изменение пространственного разделения профилей I и V ( $\Delta$ )

Расчёт SRIM показывает, что разделение профилей распределения первичных вакансий и атомов отдачи не столь существенно. Например, при имплантации As с энергией 20кэВ и дозой  $10^{13}$  см<sup>-2</sup> в Si разделение максимумов профилей составляет менее чем 2 нм (рис. 1.4). Причём изменение энергии имплантации и массы ионов качественно не меняет ситуацию.

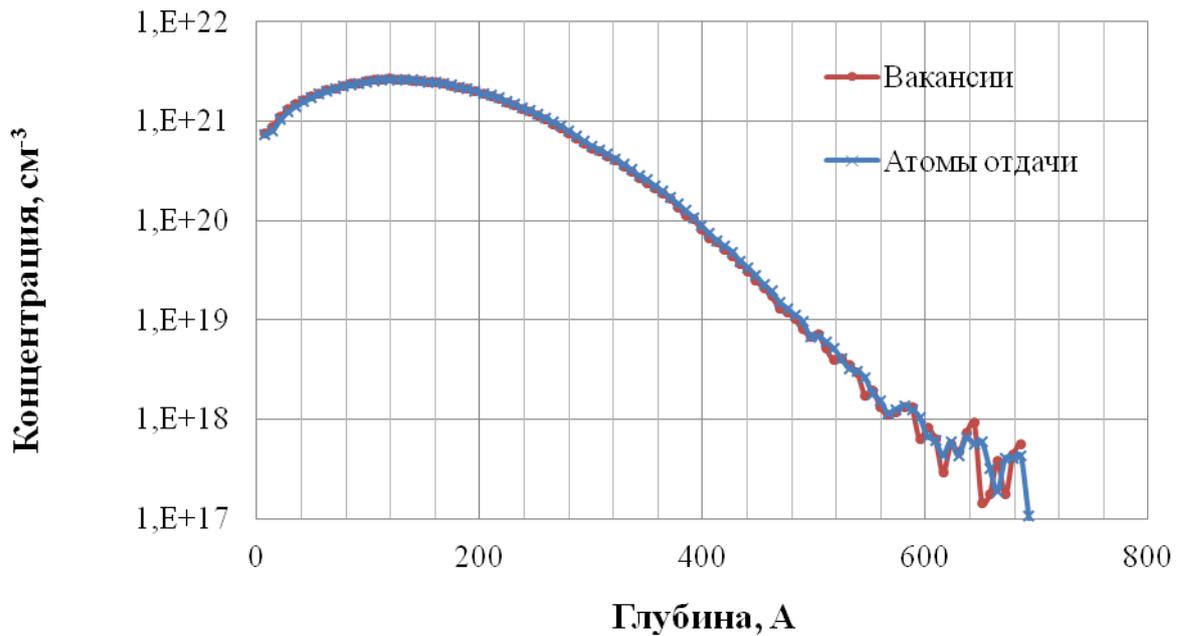


Рисунок 1.4. SRIM–профили генерации компонентов пар Френкеля, возникающих при имплантации  $\text{As}^+$  с энергией 20кэВ и дозой  $10^{13} \text{ см}^{-2}$  в Si

Однако это не означает, что пробег всех атомов отдачи столь мал. Просто на фоне малого разделения основной массы компонентов пар Френкеля, малочисленные случаи дальних пробегов не оказывают сильного влияния на статистику. Например, для ситуации имплантации As в Si, представленной выше, доля атомов отдачи с пробегом менее 2нм составляет порядка 99%. Лишь 1% атомов отдачи Si обладает существенной энергетикой. Часть из них даже достигает глубин, значительно превышающих пробег внедряемых ионов. Следует заметить, что статистика показателя разделения компонентов пар Френкеля слабо зависит от энергии имплантации, поскольку упругие потери энергии внедряемых ионов становятся велики только с приближением к области термализации иона. Сказанное выше означает, что основная масса первичных дефектов – это близкие пары Френкеля, которые склонны к безактивационной аннигиляции. Несмотря на то, что разделение профилей I и V исходно обусловлено пространственной их генерацией, конечный вид профилей в основном должен определяться последующими рекомбинационными процессами.

По литературным данным [13,14] моделирование профилей распределения первичных дефектов в Si с учетом накапливаемого кристаллом дефектного фона прогнозирует пространственное разделение областей, обогащенных вакансиями и междоузельными атомами, так что область, обогащенная вакансиями, сдвинута к поверхности. В отличие от I распределение V в данных работах не имеет явно выраженного пика, поэтому достаточно сложно дать точную количественную оценку разделению I и V. Но определенно можно сказать, что в рассмотренных случаях имплантации ионов  $O^+$  в Si с энергией 185кэВ ( $R_p \sim 0.5$  мкм) и собственных ионов  $Si^+$  с энергией 1.25МэВ ( $R_p \sim 1.5$  мкм) разделение областей, обогащенных I и V, по меньшей мере, составляет 20% от величины  $R_p$ .

Углов [15] в качестве основных механизмов пространственного структурирования первичного дефектного фона рассматривает процессы диффузионного перемешивания и рекомбинации компонент пар Френкеля. С момента образования каскада столкновений начинается интенсивное диффузионное перемешивание атомов внутри каскада, приводящее к тому, что 70-80% междоузельных атомов и вакансий рекомбинируют путем взаимной аннигиляции. Итогом описанной картины взаимодействий является образование обедненной зоны («вакансионного ядра»), окруженной «междоузельной шубой» на месте каскада (рис. 1.5). При этом дефекты, избежавшие внутрикаскадной рекомбинации, и образуют с дефектами других каскадов устойчивые комплексы первичных радиационных дефектов.

Среди теоретических представлений также следует отметить [9], где пространственное расположение дефектов вакансионного типа объясняется с позиции энергетических потерь внедряемых ионов. Поскольку лишь часть энергии ионов идет на упругие соударения (следует понимать как образование вакансий), то максимум кривой распределения вакансий всегда лежит ближе к поверхности, чем максимум распределения ионов. Однако следует обратить внимание на то, что учет обратного рассеяния ионов может качественно изменить картину относительного пространственного расположения профилей ионов и вакансий.

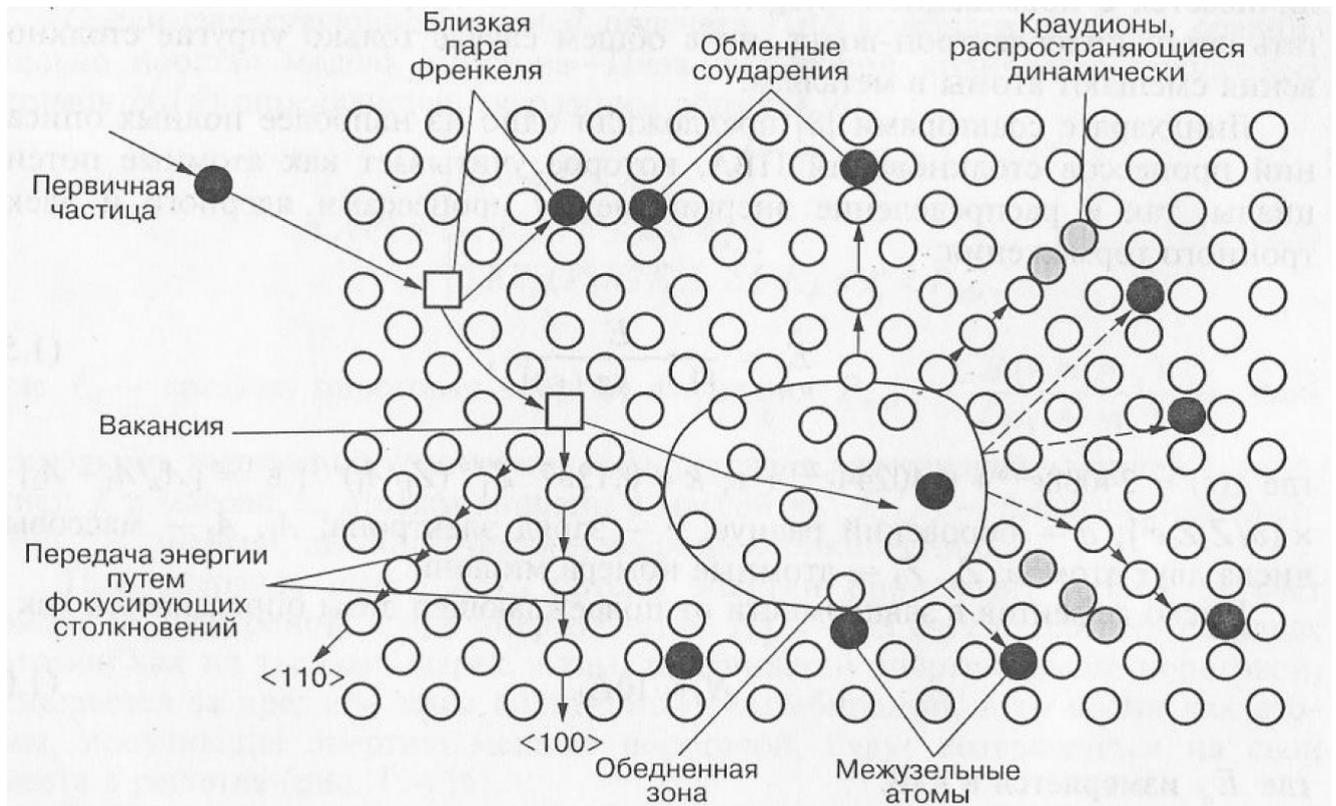


Рисунок 1.5. Схематическое изображение радиационных дефектов, возникающих при соударении одного нейтрона с атомами кристаллической решетки [15]

Большинство экспериментальных работ, посвящённых исследованию распределения первичных дефектов в Si, основаны на анализе спектра электрически-активных дефектов, создаваемых благодаря радиационным I или V. В [16,17] показано, что имплантация высокоэнергичных протонов и ионов Бора приводит к ярко выраженному эффекту пространственного разделения I и V. Величина разделения составляет 0.45-0.9 мкм при длине проецированного пробега ионов порядка 12 мкм. В [18] продемонстрирован колоссальный эффект разделения I и V от имплантации более тяжелых ионов Si, Ge и Er, достигающий 60% от значения  $R_p$ . Однако во всех упомянутых работах исследуются ситуации больших энергий ( $>680$  кэВ) и малых доз ( $<10^{10}$  см<sup>-2</sup>), что может не корректно отражать характер накопления дефектов при практически реализуемых в технологии микроэлектроники условиях имплантации. Кроме того, в [19] отмечается, что интерпретация спектра DLTS носит неоднозначный характер, в связи с чем следует с осторожностью относиться к результатам исследований.

В основе других экспериментальных работ [20,21] по диагностики распределения первичных дефектов в Si лежит анализ профилей распределения деформации, полученных по форме кривых дифракционного отражения. В [20] исследованию подверглись кристаллы Si(111), имплантированные ионами Ar<sup>+</sup> с энергией 100кэВ ( $R_p \sim 110$ нм) в диапазоне доз  $(1-8) \cdot 10^{13} \text{см}^{-2}$ . Полученные распределения вакансий и междоузельных атомов описываются функцией Гаусса, с расположением максимума концентрации вакансий на глубине 20 нм и междоузлий – 100 нм. Таким образом, пространственное разделение пиков концентраций дефектов составило 72% от величины  $R_p$ . Также большой интерес представляют результаты, полученные в [21], где исследовались особенности накопления первичных дефектов при ионной имплантации в КНИ-структуры. Авторы полагают, что встроенный диэлектрик КНИ структуры является барьером на пути движения радиационно-рожденных I, что определяет эффект более активного накопления дефектов вакансионного типа в приповерхностной области КНИ структуры по сравнению с объёмным Si. Прочие эффекты накопления дефектов вблизи межфазных границ связывают с наличием механических напряжений в структуре.

В заключении следует отметить одну из ранних работ в данной области [22], предметом которой было изучение взаимодействия подвижных радиационных дефектов с границей раздела SiO<sub>2</sub>-Si. Структура SiO<sub>2</sub>-Si облучалась протонами с энергией 10 кэВ ( $R_p \sim 100$  нм от границы раздела) в диапазоне доз  $(1 \div 500) \cdot 10^{14} \text{см}^{-2}$ . Дефектная структура анализировалась методами просвечивающей электронной микроскопии. В зависимости от способа получения пленки SiO<sub>2</sub> (анодная, термическая, пиролитическая) менялся характер накопления дефектов. Причем для высокотемпературных пленок наблюдался эффект пространственного разделения дефектных областей в Si, обогащенных I и V. Авторы приходят к выводу, что подобные эффекты не могут быть объяснены только лишь с позиций характера распределения механических напряжений.

### 1.1.3. Вторичные радиационно-термические дефекты

Практически значимыми задачами ионной технологии являются задача «залечивания» дефектной области кристалла с активацией примесных атомов и задача создания стабильных в условиях эксплуатации дефектов. Обе эти задачи могут быть решены путем отжига кристаллической структуры, который способствует трансформации первичных дефектов во вторичные радиационно-термические дефекты.

Конечным результатом ионной имплантации является формирование дефектных комплексов различного состава в объеме кристаллической решетки, устойчивых при комнатной температуре. Наиболее изученным видом комплексов на данный момент остаются комплексы междоузельных атомов. Энергия формирования комплексов междоузельных атомов сопоставима с энергией рекомбинации I и V ( $\sim 1$  эВ) [23], поэтому реакции комплексообразования протекают столь же активно, как и рекомбинационные процессы.

Термическая обработка ионно-имплантированных слоев приводит к тому, что часть первичных комплексов растворяется, пополняя раствор собственных точечных дефектов, а другая часть трансформируется в более крупные и стабильные дефекты за счет выпадения I из раствора STD. Кинетика роста радиационно-термических дефектов характеризуется стадией Оствальдовского созревания или коалесценции, т.е. наблюдается рост дефектов больших размеров за счет растворения более мелких. Однако при длительных термообработках наличие поверхностных и объёмных стоков приводит к полному растворению дефектов.

Основными типами радиационно-термических дефектов являются стержнеобразные дефекты (или  $\{113\}$ -дефекты) и дислокационные петли. Условия их формирования определяются дозой имплантации и временем отжига (рис. 1.6). При дозах имплантации выше  $10^{14}$  см<sup>-2</sup> отжиг междоузельных комплексов приводит к их трансформации в  $\{113\}$ -дефекты, а затем в более стабильные дислокационные петли. Энергия активации распада  $\{113\}$ -дефектов составляет порядка 3.7 эВ, а дислокационных петель – 4.5 эВ [24].

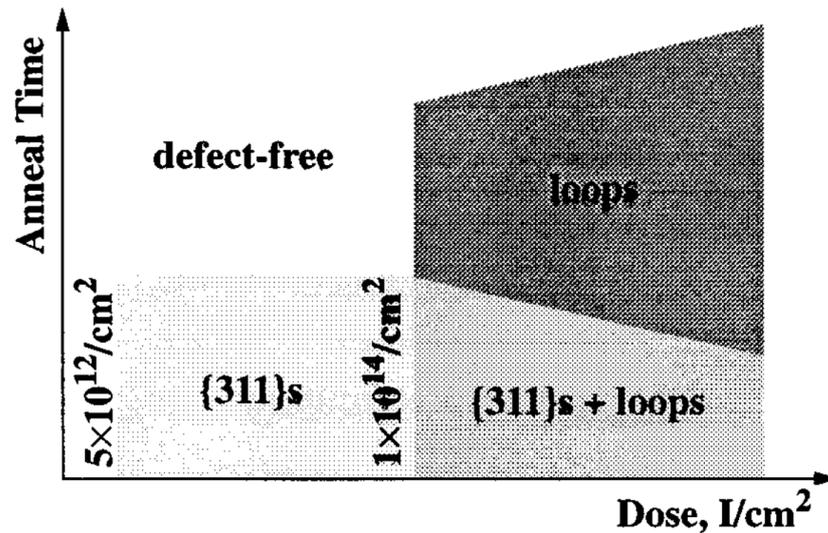


Рисунок 1.6. Диаграмма образования радиационно-термических дефектов в Si в зависимости от дозы имплантации и времени отжига [25]

Одним из серьезных ограничений радиационной физики является неполная активация примеси при создании ионно-легированных областей с локальными концентрациями близкими к пределу растворимости примеси в Si [26]. Механизм этого явления состоит в кластеризации примесных атомов с точечными дефектами в Si, протекающей во время отжига. Так деактивацию бора связывают с формированием кластеров  $B_n I_m$ , а мышьяка –  $AsV_n$ . Предполагается, что для повышения степени активации примесных атомов необходимо восполнить дефицит несвязанных в комплексы тип дефектов. Например, для повышения степени активации бора на каждый экстраактивированный атом междоузельного бора должно приходиться три вакансии [27].

#### 1.1.4. Характер взаимодействия подвижных точечных дефектов с межфазными границами

Известно, что межфазные границы являются эффективным стоком для подвижных точечных дефектов и, следовательно, могут существенно влиять на распределение первичного радиационного фона в Si.

В работах [12, 28] применительно к структуре  $SiO_2$ -Si показано, что межфазная граница является мощным стоком для дефектов. Однако такой сток

имеет разную эффективность для вакансий и собственных междоузельных атомов. С увеличением толщины пленки окисла зона стока для вакансий изменяется слабо и составляет порядка 500 нм, а вот для собственных междоузельных атомов существенно снижается от 200 нм (при  $t_{ox}=1$  нм) до значения 10 нм (при  $t_{ox}=15-30$  нм). Определенный авторами коэффициент взаимодействия вакансий с окисленной поверхностью примерно на 2 порядка превышает коэффициент взаимодействия междоузельных атомов.

В [12], используя данные о релаксационных объемах точечных дефектов, обосновано, что сток вакансий на межфазные границы обеспечивает компенсацию прироста энергии кристалла, обусловленного разделением пар Френкеля и накоплением точечных дефектов. Сток междоузельных атомов на межфазную границу является энергетически невыгодным. Кроме того, в работе сделано заключение о том, что в ситуации с высоколегированным бором кремнии сток вакансий на межфазную границу  $SiO_2-Si$  подавляется за счет реализации двухступенчатой схемы рекомбинации дефектов на атомах примеси ( $B_i+V=B_s \leftrightarrow Si_i+B_s=B_i$ ) и снижается интенсивность процесса кластеризации междоузельных атомов. Также отмечается вклад механических напряжений на границе структуры  $Si_3N_4-Si$  в уменьшение стока вакансий к межфазной границе.

В [29] ярко продемонстрировано влияние механических напряжений на перераспределение точечных дефектов в приповерхностной области  $Si$  структуры LOCOS. В области высоких напряжений сжатия наблюдается активная кластеризация дефектов междоузельного типа, что свидетельствует об усилении стока вакансий из данной области за счет повышения их коэффициента диффузии. Более того, пользуясь понятием активационного объема диффузии, в работе обосновывается большая степень влияния механических напряжений на коэффициент диффузии вакансий, а не междоузельных атомов.

В работе [22] также наблюдалось накопление междоузельных атомов в слабо сжатой приповерхностной области кремния при имплантации протонами структуры анодный  $SiO_2-Si$ . В ситуациях, когда слой  $SiO_2$  получен методами термического окисления и осаждения из газовой фазы наблюдается накопление

дефектов вакансионного типа. Дефекты междоузельной природы пространственно сдвинуты вглубь кристалла. Авторы связывают такое изменение в поведении дефектов с наличием в области межфазной границы локальных напряжений сжатия, свойственных пиролитической и термической пленкам.

В [30] методами позитронной аннигиляционной спектроскопии изучены эффекты накопления дефектов вакансионного типа вблизи границы Si-SiO<sub>2</sub> (термический). В работе продемонстрирована тенденция радиационно-рождённых V аккумулироваться в приповерхностной области Si, усиливающаяся с повышением дозы имплантации.

Таким образом, на основе изученных данных, можно однозначно сказать, что межфазные границы являются мощным стоком для точечных дефектов. Однако все разнообразие экспериментально наблюдаемых эффектов накопления дефектов в области границ нельзя объяснить с единых позиций, например, с точки зрения механических напряжений, и каждая конкретная ситуацию требует всестороннего анализа.

## **1.2. Диффузия, стимулированная неравновесными дефектами**

Хорошо известно, что диффузия большинства примесных атомов в Si осуществляется при непосредственном участии точечных дефектов (например, [31]). Исключение составляет доля быстродиффундирующих примесей (в основном металлов), не являющихся предметом исследований настоящей работы, например, Cu, Fe, Li. В зависимости от концентрации точечных дефектов, способствующих диффузионным процессам, различают равновесную и неравновесную ситуацию. При термодинамически равновесных условиях концентрация точечных дефектов в Si незначительна по сравнению с функционально значимыми концентрациями примесных атомов ( $\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$  при 1200°C) [32]. В случае создания неравновесных условий концентрация дефектов может быть увеличена на порядки, что приведет к существенному изменению коэффициента диффузии:

$$D_{eff} = D_I \frac{C_I}{C_I^*} + D_V \frac{C_V}{C_V^*}, \quad (1.4)$$

где  $D_{eff}$  - неравновесный коэффициент диффузии, а  $D_I$  ( $D_V$ ),  $C_I$  ( $C_V$ ),  $C_I^*$  ( $C_V^*$ ) – равновесный коэффициент диффузии, фактическая и равновесная концентрации междоузельных атомов (вакансий). Следует отметить, что одновременное повышение концентрации неравновесных вакансий и междоузлий в локализованной области кристалла исключено ввиду неминуемого увеличения скорости их рекомбинации [33]. Концентрация точечных дефектов в двухкомпонентном твердом растворе дефектов подчиняется закону действующих масс:

$$C_I \cdot C_V = C_I^* \cdot C_V^* \quad (1.5)$$

Это означает, что при усилении вклада одного канала диффузии, вклад второго неизбежно снижается.

Таким образом, управление концентрацией дефектов в Si позволяет осуществлять контроль над скоростью диффузии примесных атомов. Причем в зависимости от механизма диффузии и типа, преобладающих в кристалле дефектов, можно как повысить коэффициент диффузии (ускоренная диффузия), так и снизить его (заторможенная диффузия).

Условия, способствующие протеканию неравновесной ускоренной диффузии, вообще говоря, могут быть созданы как за счет радиационных, так и химических воздействий на кристаллическую решетку Si. Оба этих подхода хорошо известны и изучены в литературе. Но поскольку исследования настоящей работы лежат исключительно в области радиационной физики, то дальнейшему анализу подлежит первый из них.

### 1.2.1. Механизмы диффузии примесных атомов с участием ТД

Согласно классической теории диффузии выделяется четыре основных механизма диффузии примесных атомов в Si: прямой вакансионный, прямой междоузельный, эстафетный (непрямой междоузельный) и краудинный [34]. В дополнение к классическим представлениям была выдвинута идея о перемещении

примесных атомов в составе комплексов с одним из компонентов подсистемы дефектов, что для ряда примесей нашло теоретическое подтверждение путем компьютерного расчёта из первых принципов.

С точки зрения массопереноса примеси не имеет значения детали механизма диффузии, скажем, осуществляется ли она по прямому междоузельному механизму или в составе комплекса «примесный атом – I» – не важно. Главное то, что коэффициент диффузии определяется концентрацией дефектов междоузельного типа. В то же время для описания квазихимических реакций дефектно-примесного взаимодействия детальное понимание механизма диффузии крайне важно.

Далее представлены литературные сведения о механизмах диффузии тех примесных атомов, которые имеют прямое отношение к исследовательской части настоящей диссертационной работы.

#### Механизм диффузии Sb

Литературные данные по диффузии сурьмы не испытывают существенных противоречий. Диффузия протекает в присутствии вакансионных дефектов с вкладом междоузельного канала менее 5% [31]. Формирование нейтральных дефектных комплексов  $(Sb-V)^0$  в своих исследованиях методом ЭПР отмечает Воткинс [35]. Кроме того, имеются данные о формировании отрицательно заряженных комплексов  $(Sb-V)^-$ , полученные с помощью метода DLTS [36]. В пользу того, что массоперенос сурьмы все же осуществляется путем прямого вакансионного механизма, а не в составе парных комплексов говорит то, что энергетический барьер для скачка атома примеси замещения на место ближайшей вакансии довольно невысок (например, в [37] – 1.45эВ).

#### Механизм диффузии As

Большинство экспериментальных данных говорит о том, что As диффундирует по бинарному вакансионно-междоузельному механизму с небольшим перевесом доли вакансионного канала [38]. В теоретических же

работах, как правило, выделяется один канал диффузии и обсуждаются механизмы массопереноса As в границах заданного приближения. На основании расчётов из первых принципов, в [39] определено, что диффузия мышьяка в составе комплексов As-V и As<sub>2</sub>-V происходит с энергиями активации 1.19эВ и 2эВ соответственно. Однако в [40] показано, что вакансионные комплексы As<sub>m</sub>V и As<sub>n</sub>V<sub>2</sub> типа в присутствии междоузельных атомов кремния могут легко распадаться посредством вакансионно-междоузельной аннигиляции со значением барьера реакции 0.21эВ. В [41] определено, что при формировании ионно-имплантированных слоев, когда достигаются большие пересыщения по междоузельным атомам Si, основной вклад в диффузию мышьяка оказывает его массоперенос в составе комплексов As-Si<sub>i</sub><sup>-</sup> и As-Si<sub>i</sub><sup>0</sup> с энергиями активации 3.3-3.4эВ. В пользу последнего вывода говорят результаты экспериментальной работы [42], где отжигались ионно-имплантированные слои As в Si методом лампового отжига, способствующего генерации неравновесных вакансий. Из наблюдающейся зависимости коэффициента диффузии от дозы облучения авторы приходят к выводу, что атомы Si непосредственно ускоряют диффузию As, вероятнее всего за счет образования высокоподвижных комплексов As-I.

### 1.2.2. Диффузия, ускоренная ТД радиационного происхождения

Радиационно-ускоренная диффузия является следствием формирования и накопления в кристаллической решетке, содержащей примесные атомы, огромного числа неравновесных дефектов под действием радиации. Агломераты накопленных дефектов становятся нестабильны при повышенных температурах и испускают точечные дефекты, в общем случае, как вакансионного, так и междоузельного типа. Таким образом, в диффузионной зоне поддерживается концентрация точечных дефектов, превышающая термодинамически равновесное значение, и в соответствии с (1.4) повышается коэффициент диффузии примеси.

В [43] установлено, что ускоренная диффузия, поддерживаемая неравновесными I, носит двухстадийный характер. На первом кратковременном этапе ускорение достигается за счет распада мелких радиационных кластеров. По

мере проведения отжига формирование радиационно-термических дефектов способствует снижению концентрации свободных  $I$  в области максимума распределения дефектов и, как следствие, коэффициента диффузии. Второй этап ускоренной диффузии связан с распадом радиационно-термических дефектов, поставляемых  $I$  в твердый раствор СТД. Вклад первой стадии ускоренной диффузии наиболее существенен при малых дозах имплантации, второй – при больших, но доаморфизационных. При этом время радиационно-ускоренной диффузии соответствует времени распада радиационно-термических дефектов, что подтверждено ПЭМ-анализом дефектной области кристалла на разных временных отрезках протекания отжига.

Длительность протекания радиационно-ускоренной диффузии существенно зависит от температуры отжига. Несмотря на то, что с повышением температуры отжига скорость растворения радиационно-термических дефектов и уровень пересыщения решетки  $Si$  точечными дефектами повышаются, высокий коэффициент диффузии дефектов способствует быстрому рассасыванию пересыщенных областей и снижению итоговой длины диффузионного пробега примеси. Это явилось основной причиной, обусловившей применение быстрого высокотемпературного отжига в технологии микроэлектроники [44].

Количественный показатель ускорения диффузии сильно зависит от условий ионной имплантации и отжига. В [45] определено, что в диапазоне концентраций радиационных дефектов  $7 \cdot 10^{18} - 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  коэффициент диффузии Бора превышал равновесное значение в 7 - 70 раз при отжиге с температурой  $1050^\circ\text{C}$  в течении 10с. Там же отмечается, что при ламповом отжиге с температурой  $900^\circ\text{C}$  коэффициент диффузии фосфора из слоя внедрения может превышать равновесное значение в 1000 раз. Близкая к этому значению оценка сделана в [46] в отношении диффузии имплантированного мышьяка при отжиге с температурой  $850^\circ\text{C}$ . Таким образом, коэффициент диффузии примеси, стимулированной фоном накопленных радиационных дефектов, может превышать равновесное значение на несколько порядков.

Один из методов подавления радиационно-ускоренной диффузии состоит в совместной имплантации примесных атомов с атомами, представляющими центры захвата точечных дефектов [47]. Например, ускоренная диффузия бора подавляется за счет совместной имплантации атомов углерода, азота или фтора, которые захватывают собственные междоузельные атомы, способствующие диффузии бора (рис. 1.7).

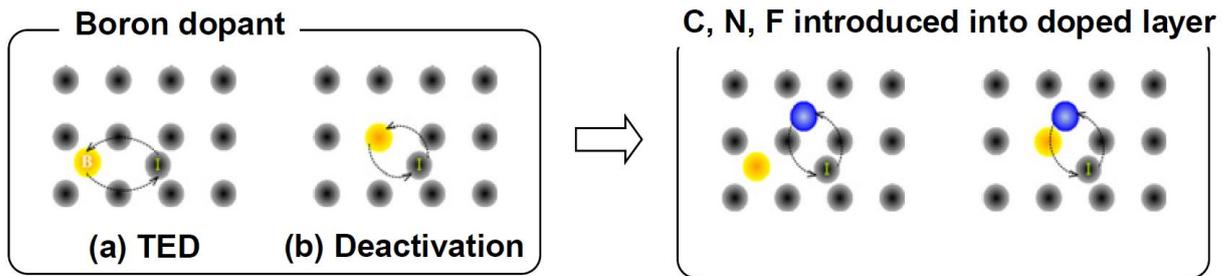
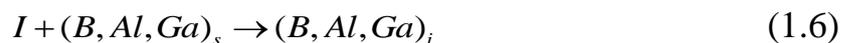


Рисунок 1.7. Схема деактивации диффузии бора за счет совместной имплантации атомов C, N или F [47]

В основе другого метода – криогенной имплантации лежит идея о снижении концентрации запасенных точечных дефектов в неаморфизованной области кристалла, которые и дают основной вклад в пересыщение твердого раствора СТД [48]. Кроме того, как было сказано ранее, подавлению диффузии способствует высокая температура отжига, что обусловило применение лазерного отжига.

### 1.2.3. Эффект Воткинса

В сущности, эффект Воткинса заключается в реакции взаимодействия примесных атомов с междоузельными атомами кремния в Si. Воткинсом было обнаружено, что в процессе облучения кремния примесные атомы B, Al, Ga вытесняются из узлов решетки возникающими междоузельными атомами Si:



Поскольку реакция наблюдалась при крайне низких температурах 0.5 - 20.4К возникла идея об атермической миграции I. Одна из моделей, качественно описывающая экспериментальные данные, основывается на том, что причина такой миграции связана не с атомом Si, а с примесью замещения [49]. Согласно

этой модели, I движется в поле упругих напряжений, создаваемых примесями замещения (рис. 1.8). Атомы кремниевой решетки в области узла примесного атома смещены из равновесного положения, что приводит к их поляризации, т.е. появлению электрического дипольного момента. В результате этого появляется наведенный дипольный момент междуузельного атома Si, который заставляет двигаться атом в область увеличения дипольного момента решеточных атомов, т.е. к узлу примеси замещения.

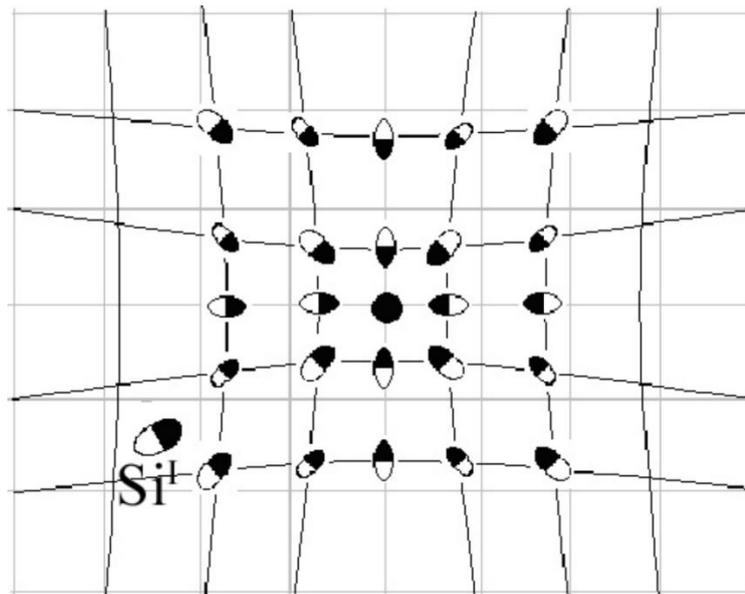


Рисунок 1.8. Миграция междуузельного атома кремния в поле упругих напряжений примеси замещения [49]

В [50] было показано, что эффект Воткинса работает не только для примесей III-группы, но и для некоторых примесей V группы (например, P и Sb). Главным условием наблюдения эффекта является отличие значений ковалентного радиуса атома примеси от атома Si.

В дополнении к описанию механизма реакции Воткинса следует отметить современные расчёты из первых принципов, которые показывают, что для реакции бора с собственным междуузельным атомом наиболее выгодным результатом будет объединение этих компонентов в комплекс [23]. Кроме того, в [23] высказывается предположение о том, что в процессе реакции Воткинса не происходит чистого вытеснения примесного атома в междуузельную позицию, а

формируется подвижный комплекс бора в узловом положении с междуузельным атомом кремния ( $B_sI$ ).

Одним из серьезных вопросов, связанных с изучением диффузии примесных атомов, является эффективность проявления эффекта Воткинса непосредственно во время имплантации. В [51] показано, что эффект Воткинса имеет сильную зависимость от уровня ионизации в ионно-имплантированном слое. Неравновесные дырки и электроны экранируют диполь-дипольное взаимодействие, снижая эффективность эффекта Воткинса. Если в эксперименте, проведенном Воткинсом, облучение проводилось электронным пучком, создающим слабую ионизацию, то при имплантации тяжелых ионов с высокими плотностями тока ионов эффект вытеснения примеси по реакции Воткинса будет незначителен.

#### **1.2.4. Эффект вакансионного и междуузельного ветра**

В ситуации, когда в диффузионной зоне каким-либо способом возникает направленный поток вакансий или междуузельных атомов характер диффузии примесных атомов будет существенно меняться. То обстоятельство, что на фоне хаотически мигрирующих дефектов существуют направленные потоки дефектов, приведет к тому, что вероятность скачка примесного атома в направлении потока дефектов и против него окажется различной. Причем в том случае, когда поток по типу дефектов не совпадает с основным каналом диффузии примесных атомов, будет наблюдаться торможение диффузии примесных атомов. В иной ситуации диффузия примеси будет ускоряться: в направлении потока дефектов в случае междуузельных атомов и в противоположном потоку дефектов направлении в случае вакансий.

Механизм такого перераспределения примеси может быть объяснен с позиций теории парной диффузии «дефект – атом примеси» [31]. В рамках этого подхода массоперенос примеси осуществляется в составе парного комплекса в направлении градиента концентрации пар, а пространственное распределение пар определяется произведением профилей концентрации дефектов и примесных

атомов. Математически поток примесных атомов описывается модифицированным уравнением Фика, которое для ситуации вакансионного ветра имеет вид:

$$J = -D \left( \frac{C_v}{C_v^{eq}} \frac{\partial C}{\partial x} + C \frac{\partial C_v}{\partial x} \right) \quad (1.7)$$

где  $C$ ,  $C_v$ ,  $C_v^{eq}$  - концентрация примесных атомов, вакансий и термодинамически равновесная концентрация вакансий,  $D$  – равновесный коэффициент диффузии примесных атомов. Для случая междоузельного ветра поменяется знак перед вторым членом правой части уравнения.

### 1.2.5. Сегрегация примесных атомов на межфазных границах

Сегрегация примесных атомов заключается в перераспределении примесных атомов вблизи границ раздела многофазной системы. В отличие от диффузионных процессов, приводящих, за редким исключением, к концентрационному сглаживанию, сегрегация способствует возникновению локального градиента концентрации примесных атомов.

Причиной сегрегации является термодинамический стимул системы к выравниванию градиента химического потенциала примеси по разные стороны от межфазной границы. Появление границы изменяет характер взаимодействия компонентов твёрдого раствора посредством связанных с ней электрических и механических полей, что способствует изменению коэффициента химической активности примесных атомов и, они ведут себя так, будто их концентрация отличается от фактической.

Достаточным условием для возникновения сегрегации является наличие каналов поставки примесных атомов, т.е. устойчивых потоков точечных дефектов. Благодаря тому, что ионная имплантация создает комплексы дефектов в избыточном количестве, такая ситуация легко реализуется при отжиге в процессе распада радиационно-термических дефектов.

Количественно эффект сегрегации характеризуется равновесным коэффициентом сегрегации  $m_0 = C_0^{фаза1} / C_0^{фаза2}$  - отношением равновесных

растворимостей примеси в фазовом состоянии 1 и 2 при заданной температуре. Для гетеросистемы  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , являющейся объектом исследования данной работы, принято считать, что коэффициент сегрегации бора равен 0.3, а мышьяка, фосфора и сурьмы  $\sim 10$ . Т.е. примеси V группы имеют свойство накапливаться в поверхностном слое Si системы  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , а бор диффундировать в  $\text{SiO}_2$  сквозь границу (рис. 1.9).

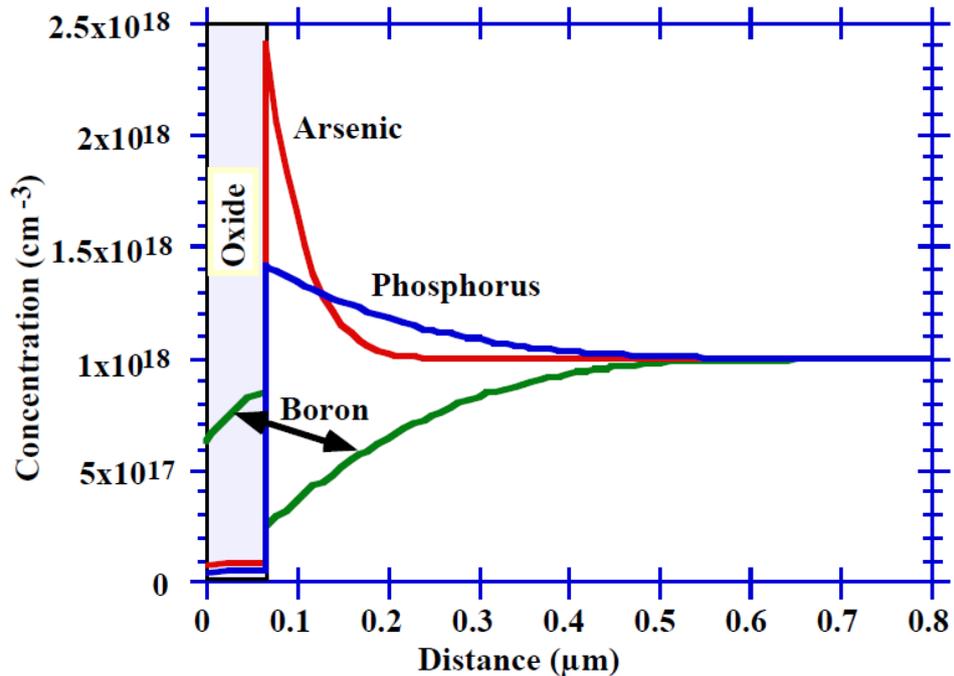


Рисунок 1.9. Особенности распределения примесных атомов в области границы раздела фаз структуры  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , обусловленные эффектом сегрегации [53]

Накопление примесных атомов в кремниевой решетке в области межфазной границы имеет ряд нежелательных особенностей, имеющих экспериментальное подтверждение. Во-первых, примесные атомы захватываются на границе раздела и располагаются в поверхностном слое Si, а во-вторых, они находятся в неактивированном состоянии [52].

### 1.2.6. Диффузия, стимулированная электрическим полем

Поскольку компоненты подсистемы дефектов кристаллической решетки кремния характеризуются зарядовым состоянием, то появление дальнедействующего электрического поля в кристалле будет способствовать

изменению характера и направленности диффузионных процессов. Причиной появления электрического поля в объёме кристаллической решетки может являться как встроенный потенциал на границе гетерогенных структур, так и пространственное разделение примеси замещения с носителями заряда вследствие высокой подвижности последних.

Действие электрического поля на диффузию примеси может оказываться напрямую, но только в том случае если примесь находится в положении замещения, т.е. является электрически активной. В этой ситуации диффузия донорной примеси будет усиливаться в направлении поля, а акцепторной – против поля (рис. 1.10).

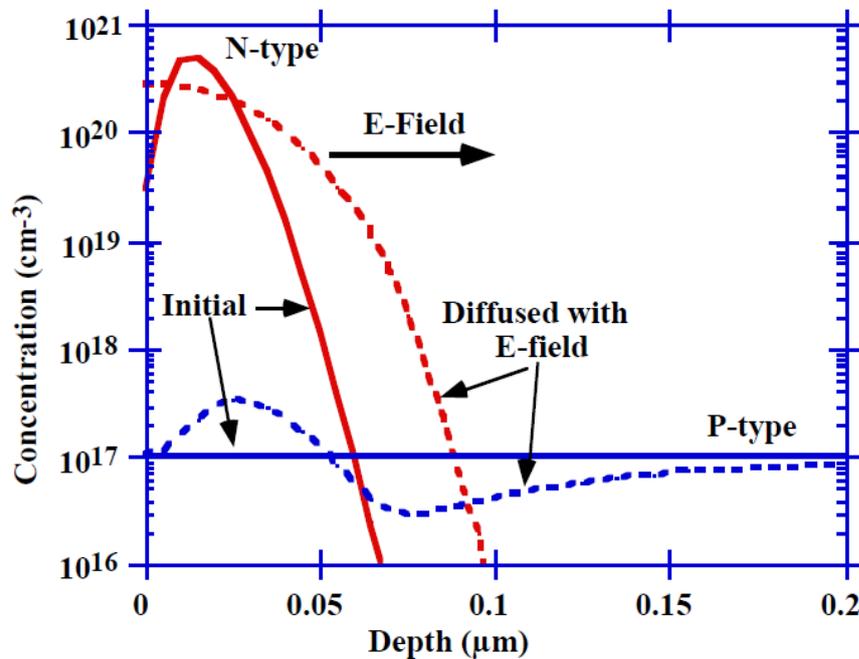


Рисунок 1.10. Особенности диффузии примесных атомов, обусловленные наличием внутренних электрических полей [53]

Кроме того, действие электрического поля на примесные атомы может оказываться и косвенно через подсистему СТД. Однако следует оговориться, что эта ситуация существенна при высоких неравновесных концентрациях СТД, когда высока вероятность дефектно-примесного взаимодействия. Точечные дефекты обладают целым набором зарядовых состояний, меняющихся при смене конфигурации соседствующих с дефектом атомов. Вакансии могут находиться в

пяти различных зарядовых состояниях:  $V^{2-}$ ,  $V^-$ ,  $V^0$ ,  $V^+$  и  $V^{2+}$ , а междоузельные атомы в четырех –  $\Gamma$ ,  $\Gamma^0$ ,  $\Gamma^+$  и  $\Gamma^{2+}$  [54]. Каждому типу дефекта соответствует энергетический уровень в запрещенной зоне Si, и равновесная концентрация определяется разностью энергий этого уровня и уровня Ферми. Поэтому в Si n-типа преимущественно должны наблюдаться отрицательно заряженные дефекты, а в Si p-типа – положительно заряженные. Таким образом, в присутствии электрического поля будут обеспечены однонаправленный дрейф дефектов каждого типа и электрически-стимулированная диффузия примесных атомов посредством этих дефектов.

Математически, поток примесных атомов с учетом диффузии, стимулированной электрическим полем, может быть описан первым законом Фика, включающим дрейфовый член:

$$J = J_{\text{диф}} + J_{\text{дрейф}} = -D \frac{\partial C}{\partial x} + \mu EC, \quad (1.8)$$

где  $\mu$  - подвижность примесных атомов, а  $E$  - значение электрического поля.

### 1.2.7. Диффузия в механических полях

В присутствии механических полей дефекты в кристаллической решетке кремния перераспределяются по вполне определенным законам. Термодинамически выгодным является перемещение дефектов вакансионного типа в сжатую область кристалла, а междоузельного типа – в растянутую [55]. Дрейфовые потоки точечных дефектов, направленные в деформированные области кристалла, увлекают за собой примесные атомы, что изменяет характер диффузионного процесса. По мере стока дефектов деформированная область постепенно «залечивается», способствуя снижению дрейфового потока точечных дефектов вплоть до его полного исчезновения, т.е. механически-стимулированная диффузия нестационарна. Дрейфовый поток дефектов, обусловленный градиентом механических напряжений, можно представить в следующей форме:

$$J_{\text{дрейф}} = \frac{D}{kT} C \nabla \sigma, \quad (1.9)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии дефекта,  $\nabla\sigma$  - градиент напряжений в кристаллической решетке.

Экспериментально влияние механических напряжений на диффузию примесных атомов широко исследовано в гетероструктурах  $\text{Si-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . Комплексный анализ этих исследований проведен в [56]. В зависимости от характера напряжений в работах наблюдалась как заторможенная диффузия В и Sb, так и ускоренная диффузия В.

### 1.3. Прикладные задачи стимулированной диффузии

С развитием микроэлектроники конструктивно–технологические требования, предъявляемые к активным областям изделий, постепенно ужесточались. Независимо от конструкции изделий и технологии их изготовления требования касаются геометрии активных областей и степени активации примесных атомов в них. В области планарной технологии субмикронных размеров наиболее критичными параметрами являются глубина залегания стока/истока и слаболегированной области их расширения в канал, а также поверхностная концентрация примесных атомов [44]. В глубокосубмикронных технологиях акцентируется важность крутизны профиля легирования стока/истока в направлении канала, поскольку паразитное сопротивление, обусловленное уширением профиля, становится сравнимым с сопротивлением канала транзистора [57].

В [58] предложен дизайн легирования планарного транзистора с  $L_g=25\text{nm}$ , оптимального с точки зрения выходных электрофизических параметров изделия (рис. 1.11). Крутизна профиля легирования истока в направлении канала составляет 2.7 нм/дек, что находится на уровне естественного диффузионного размытия ионно-имплантированного профиля и накладывает жесткие требования на диффузионные процессы и термобюджет технологии в целом, что особенно затруднительно с учетом эффекта ускоренной диффузии примесных атомов. Следует отметить, что такие профили невозможно получить с помощью метода эпитаксиального дорастивания легированных слоев, пришедшего на смену

процессам ионной имплантации, ввиду планарной однородности получаемых слоёв. А это значит, что задача оптимального легирования планарного глубокосубмикронного транзистора может быть решена только путем совершенствования методик ионной имплантации и диффузионных процессов.

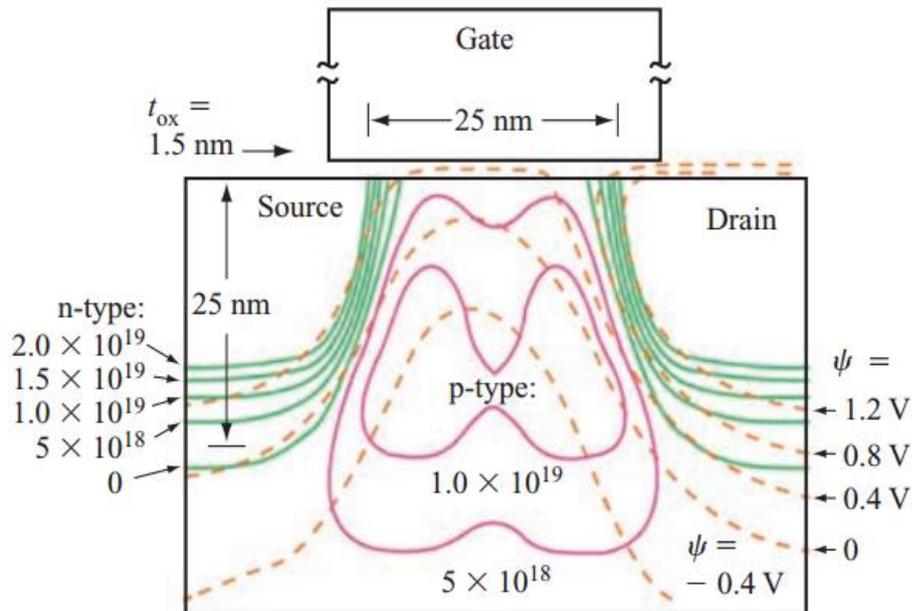


Рисунок 1.11. Оптимальный дизайн профилей легирования Si полевого транзистора с длиной затвора 25 нм [59]

Новые задачи создания активных областей возникают при разработке перспективных объёмных транзисторных структур. В частности, одной из таких структур является транзистор с вертикальным каналом (рис. 1.12).

По всей видимости, главным технологическим препятствием на пути изготовления таких структур является легирование области расширения истока. Ввиду интеграции комплементарных транзисторных структур в архитектуре большинства типов интегральных схем методы эпитаксиального роста в данной технологии не применимы. Формирование области истока с обратной стороны пластины также имеет свои недостатки, начиная от высокого электрического сопротивления области истока и заканчивая трудностями в разработке архитектуры и топологии схемы. Основным решением на данный момент является локальное легирование расширения области истока методом прямой ионной имплантации. Поскольку канал при этом должен быть защищен (затвором

или маской), то область расширения истока непосредственно под каналом находится в тени и недоступна для ионного пучка. Её легирование достигается путем латерального диффузионного затягивания в процессе отжига.

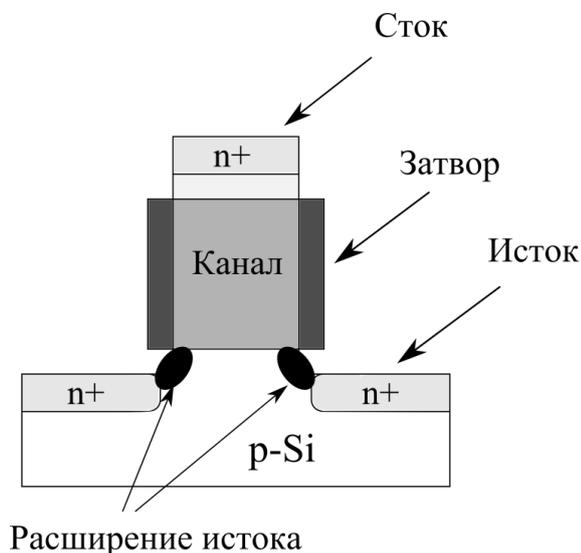


Рисунок 1.12. Схематичное изображение структуры полевого транзистора с вертикальным каналом в поперечном сечении

Помимо примесных атомов, важным объектом исследования являются радиационно-термические дефекты, которые могут лежать в основе создания светоизлучающих центров в кремнии в качестве альтернативы GaAs, сложно совмещаемого с кремниевой КМОП технологией. Хорошо известно, что вторичные радиационно-термические дефекты обладают люминесценцией в области максимальной оптической прозрачности кварцевых волноводов – 1,54 мкм.

Природа и механизм формирования излучающих центров радиационно-термической природы до сих пор является предметом обсуждений. Так, например, в [4] обсуждается то, что за излучательные свойства Si ответственны стержнеобразные дефекты, а появление дислокационных петель внедренного типа сопровождается гашением фотолюминесценции. В [59] дислокации наоборот рассматриваются как основной источник излучения. Более того, люминесценция может быть обусловлена не структурой РТД, а модификацией матрицы кристалла за счет механических напряжений, сопутствующих росту РТД. Речь идет о

формировании вкраплений гексагональной фазы  $Si_3$ , способствующей высокой эффективности люминесценции [6].

Несмотря на то, что природа излучательных РТД до конца не ясна, результаты исследований, имеющиеся в литературе, однозначно указывают на то, что наблюдается связь люминесцентных свойств с концентрацией РТД междуузельной природы. А поскольку концентрация РТД I-типа определяется интегральной степенью пересыщения кремниевой решетки по I в процессе отжига, то любое изменение баланса между первичными I и V в сторону повышения доли междуузельных атомов потенциально будет способствовать росту эффективности люминесценции.

#### **1.4. Выводы к главе 1**

В главе представлены обзорные сведения по первичному и вторичному дефектообразованию в облученном кремнии. Особое внимание уделяется процессам пространственного структурирования первичного дефектного фона и в особенности эффекту разделения радиационных I и V, на базе которого строятся основные рассуждения диссертационной работы.

В части вторичных процессов дефектообразования, протекающих во время термического отжига, подробно обсуждаются условия и кинетика неравновесной радиационно-ускоренной диффузии, а также ряд процессов, сопутствующих диффузионным процессам: эффект Воткинса, эффект вакансионного и междуузельного ветра, сегрегация примесных атомов. Кроме того, рассмотрены методы стимулирования диффузии за счет внутренних электрических и механических полей.

В завершении главы рассмотрены актуальные прикладные задачи стимулированной диффузии примесных атомов в области кремниевой микроэлектроники. Требования планарной и 3D технологии микроэлектроники состоят в контролируемом и прецизионном создании ионно-легированных областей специальных концентрационных профилей примесных атомов, которые могут быть получены за счет создания особых условий эволюции дефектного

фона и, как следствие, стимулированной диффузии примеси. Дополнительным стимулом исследования новых подходов к образованию и поведению радиационных дефектов является изменение состава и плотности радиационно-термических дефектов, рассматриваемых как потенциальных компонентов перспективной Si оптоэлектроники.

## **ГЛАВА II. ЭФФЕКТ УСТОЙЧИВОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ КОМПОНЕНТ ПАР ФРЕНКЕЛЯ В СЛОИСТЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ**

В главе развиты представления о новых, ранее не исследуемых особенностях распределения радиационных СТД в слоистых структурах на основе Si. Такие особенности удалось теоретически предсказать, базируясь на общих положениях теории пробегов и образования дефектов при ионной имплантации в твердые тела. Дальнейшему развитию модельных представлений способствовали экспериментальные данные по пространственному распределению радиационных СТД в слоистых гетерогенных структурах на основе Si, полученные в настоящей работе методами рентгеновской дифракции и обратного резерфордовского рассеяния.

Результаты теоретических и экспериментальных исследований данной главы легли в основу изучения новых и пересмотра трактовки уже известных эффектов стимулированной фоном радиационных дефектов диффузии примесных атомов, обсуждаемых в следующей главе.

### **2.1. Феноменология эффекта на границах раздела гетероструктур**

Образование радиационных дефектов и их эволюция в процессе постимплантационного отжига в гетерогенных структурах будет иметь существенное отличие от ситуации с гомогенной подложкой. Уже процессы формирования первичного дефектного фона в этом случае будут подвержены влиянию межфазных границ и структурных особенностей фазовых состояний, что приведет к иным конечным профилям распределения радиационных дефектов. Но главная практическая ценность этой ситуации заключается в том, что различная диффузионная прозрачность фаз для СТД будет создавать особые условия для их перераспределения на стадии отжига. Далее будет показано, что при определенных соотношениях параметров гетероструктуры и условий имплантации можно добиться интегрального разделения компонент пар Френкеля, устойчивого даже при существенном температурном воздействии.

### 2.1.1. Качественное распределение вакансий и междоузлий в ионно-имплантированных гетероструктурах

В процессе упругого взаимодействия ускоренного иона с матричными атомами мишени вдоль траектории торможения образуются разделенные пары Френкеля: вакансии (V) и собственные междоузельные атомы (I). При сквозной ионной имплантации примесных атомов в многослойные гетерогенные структуры из  $i$  слоев различной фазы V и I образуются в каждом слое (рис. 2.1).

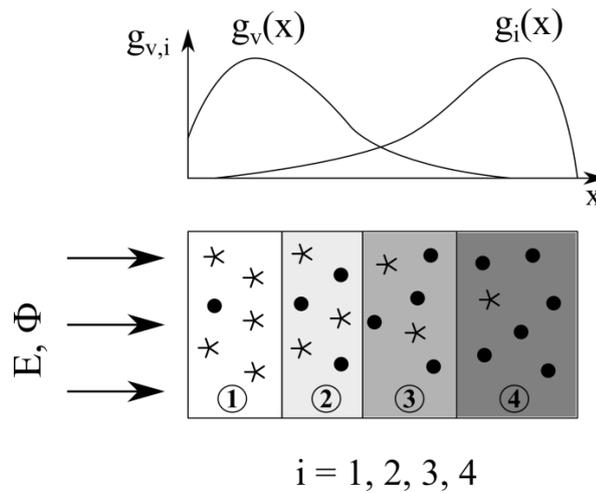


Рисунок 2.1. Качественная картина распределения V (обозначены \*) и I (обозначены ●) при имплантации многослойных гетероструктур в области проецированного пробега  $R_p$ , сопоставимого с толщинами слоев гетероструктуры

Важно отметить, что распределения скоростей генерации разделенных пар Френкеля  $g_v(x)$  и  $g_i(x)$  пространственно смещены относительно друг друга вдоль направления пробега  $x$ . В главе 1 приведены литературные данные, показывающие, что в случае гомогенной подложки Si такое смещение может достигать более 20% от значения  $R_p$ . Основываясь на том, что разделение V и I исходно обусловлено импульсным сдвигом атомов отдачи в направлении имплантации, справедливо полагать, что подобный характер распределения дефектов присущ не только кремниевой решетке, но и решеткам других фаз. В таком случае качественная картина распределения V и I в фазах многослойной гетероструктуры будет соответствовать ситуации с гомогенной подложкой (рис. 2.1).

В случае гомогенной мишени эффекты от такого сдвига в распределениях  $V$  и  $I$  частично нивелируются их диффузионным перемешиванием на стадии постимплантационного отжига. Для ряда гетероструктур можно ожидать сохранение устойчивого разделения областей, обогащенных  $V$  и  $I$ . В первую очередь это относится к ситуации, когда средний проецированный пробег ионов  $R_p$  находится вблизи залегания границы раздела двух фаз гетероструктуры. На рис.1 такая граница раздела лежит между слоями 2 и 3. В этом случае большинство  $V$  остаются слева от границы раздела в фазах 1 и 2, а большинство  $I$  справа – в фазах 3 и 4. Дальнейшему диффузионному перемешиванию  $V$  и  $I$  и их последующей рекомбинации будут мешать сложности межфазной инвертации дефектов, «диффузионная непрозрачность» границ раздела, связанная с различием в подвижности  $V$  и  $I$  в фазах, а также их миграция на межфазные стоки. Кроме того, возможно искусственно создать ситуацию устойчивого разделения радиационных профилей  $V$  и  $I$  путём селективного удаления крайних слоёв гетероструктуры.

В результате, гипотетически возможно возникновение уникальной для радиационной физики ситуации сепарирования компонент пар Френкеля в фазах многослойной гетероструктуры. Вследствие этого могут быть созданы особые, недостижимые при имплантации гомогенного образца, условия для диффузионного перераспределения имплантированных примесных атомов и эволюции радиационно-термических дефектов.

Особое внимание следует уделить влиянию стоков в виде межфазных границ на процессы рекомбинации и кластеризации дефектов ввиду их близости к области протекания первичных и вторичных процессов дефектообразования. В отношении к двухфазным слоистым структурам на основе  $Si$  такие эффекты подробно будут обсуждаться в параграфе 2.1.2.

С математической точки зрения, распределения концентраций собственных дефектов  $C_V(x)$  и  $C_I(x)$  в слоистой структуре могут быть описаны классическим нестационарным уравнением диффузии (2.1), включающим диффузионный,

генерационный  $g(x)$ , рекомбинационный  $r(x)$  члены уравнения и аннигиляцию дефектов на стоках  $R_c(x)$ :

$$\frac{\partial C_{I(V)c}}{\partial t} = D_{I(V)} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + g(x) - r(x) - R_c(x) \quad (2.1)$$

Решение представляется кусочно-гладкими кривыми с учетом граничных условий на интерфейсах фаз. Граничные условия задаются концентрациями  $C(x_i)$  и (или) потоками  $D(\partial C/\partial x)|_{x_i}$  точечных дефектов на каждом  $i$ -ом интерфейсе. Решение может сшиваться или иметь разрывы при  $x_i$  в зависимости от прозрачности границ.

### **2.1.2. Расчет параметров имплантации для достижения эффекта разделения V и I в двухслойных структурах на основе Si**

Начальные экспериментальные исследования эффекта устойчивого интегрального разделения I и V целесообразно проводить на примере двухфазных слоистых структур на основе Si. Такой выбор мотивирован практической ценностью результатов для Si микроэлектроники и тем, чтобы не усложнять задачу анализа профиля распределения первичных дефектов влиянием сразу нескольких межфазных границ.

Для целого ряда двухслойных гетероструктур на основе Si следует ожидать устойчивого разделения дальних пар Френкеля на границе раздела фаз. Основным условием для выделения такой группы структур является различная диффузионная прозрачность их фазовых состояний для I и V. Среди всего многообразия материалов кремниевой микроэлектроники такие структуры довольно часто используются, в том числе, и в традиционных задачах ионной имплантации. Их можно разделить две группы:

- диэлектрические пленки на Si ( $\text{SiO}_2$ -Si,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ -Si и др.);
- КНИ структуры (Si-SiO<sub>2</sub> и Si-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>).

При этом для достижения практически значимых следствий от эффекта разделения I и V на границе фаз гетероструктуры должны быть обеспечены

особые условия имплантации в части соотношения глубины залегания границы раздела фаз и среднего проецированного пробега внедряемых ионов.

**Расчет поправок к расположению  $R_p$  по отношению к интерфейсу структур**

Известно, что максимум распределения упругих потерь энергии ионов расположен несколько ближе к поверхности, чем их средний проецированный пробег. Моделирование в программной среде SRIM показало, что при ионной имплантации в Si этот дисбаланс составляет  $(0.3-0.4)R_p$  в области малых и средних энергий ионов различных масс (рис. 2.2).

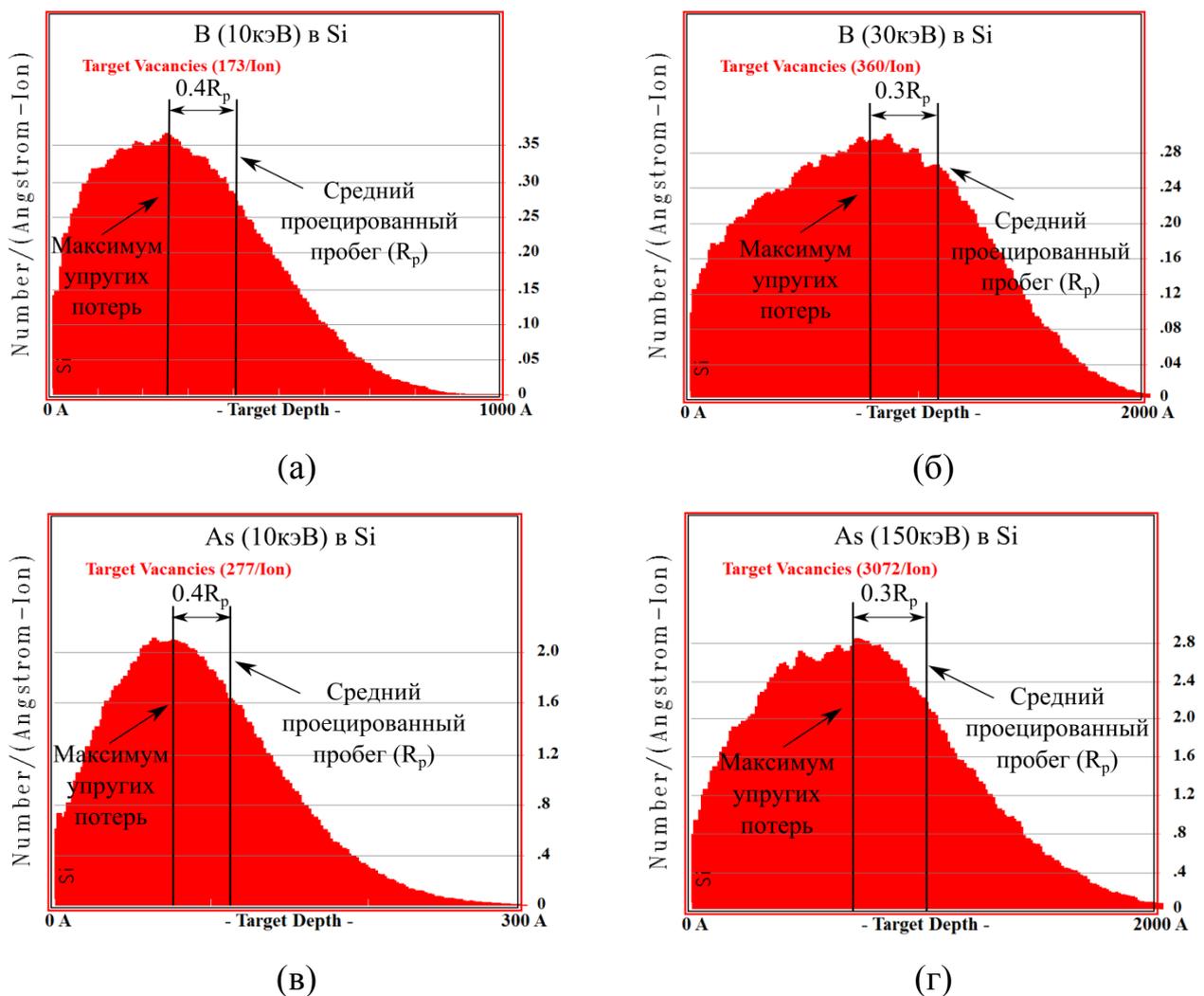


Рисунок 2.2. Профили упругих потерь энергии в Si при имплантации ионов различных масс и энергий: (а) – бор с энергией 10кэВ, (б) – бор с энергией 30кэВ, (в) – мышьяк с энергией 10кэВ и (г) – мышьяк с энергией 150кэВ. На графиках также указано положение  $R_p$  и смещение максимума упр. потерь относительно  $R_p$ .

Профиль распределения первично рождённых вакансий описывается экспоненциальным законом, т.е. представляет собой достаточно крутую функцию. Начиная с положения максимума упругих потерь, концентрационный профиль вакансий будет снижаться при дальнейшем увеличении глубины. Спонтанные рекомбинационные процессы в значительной степени снизят количественное значение остаточных дефектов, но вид кривой их распределения при этом не должен качественно измениться. Допуская также, что диффузионные процессы, сопутствующие процессу облучения, не сильно искажают наклон ниспадающей части профиля генерации первичных дефектов, следует ожидать, что концентрация  $V$  глубже области среднего проецированного пробега незначительна в сравнении с  $I$ . Таким образом, в рамках используемого приближения об интенсивности генерации первичных дефектов в гетерогенных структурах можно полагать, что при локализации межфазной границы двухслойных структур в области  $R_p$  слева от неё будут сосредоточены преимущественно вакансионные дефекты, а справа – дефекты междоузельного типа. Данное положение о локализации  $R_p$  на границе раздела фаз и будем далее считать достаточным условием для возникновения эффекта устойчивого разделения компонент дальних пар Френкеля в двухслойных структурах.

### **Структуры «диэлектрик-Si» и «Si-диэлектрик-Si» (КНИ)**

При выполнении всех обсужденных выше условий для возникновения устойчивого интегрального разделения дальних пар Френкеля может быть реализовано две принципиально различные картины накопления радиационных дефектов в кремниевой решетке двухфазных слоистых структур на основе Si. Так как область, обогащенная  $I$ , всегда пространственно сдвинута вглубь подложки, то в зависимости от отношения диффузионной прозрачности фаз структуры и их взаимного расположения может наблюдаться аккумуляция в Si дефектов вакансионного, либо же междоузельного типа. Первая из указанных ситуаций реализуема при облучении КНИ структуры, а вторая – структуры класса «диэлектрик-Si» (рис. 2.3).

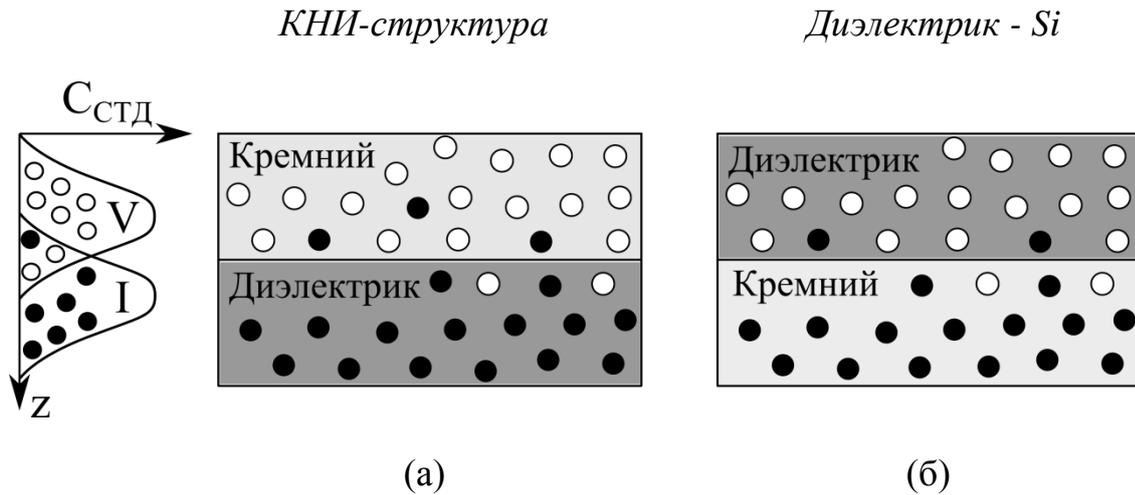


Рисунок 2.3. Качественная картина фазового разделения компонент дальних пар Френкеля в КНИ структурах – (а) и структурах типа диэлектрик – Si – (б)

Если разделение профилей генерации первичных дефектов практически не зависит от энергии и массы внедряемых ионов, то итоговая картина интегрального разделения радиационных дефектов после протекания рекомбинационных процессов существенно зависит от указанных параметров. Поскольку потери энергии внедряемых ионов повышаются с увеличением их массы, относительное значение показателя разделения  $\Delta/R_p$  выше при использовании тяжелых ионов с малыми энергиями имплантации. Несмотря на то, что абсолютное значение  $\Delta$  слабо зависит от энергии и массы ионов, дисперсия распределения радиационных дефектов с повышением энергии будет увеличиваться, что может нивелировать интегральное разделение компонентов пар Френкеля.

В случае ионов малых масс процессу имплантации будет сопутствовать генерация отдельных подвижных точечных дефектов, сильно подверженных влиянию поверхностных стоков в виде межфазных границ. Это будет нарушать исходное соотношение интегральных концентраций компонентов первичных радиационных пар Френкеля в Si фазе структур и приводить к сильной зависимости эффекта разделения от состава материалов структур и метода их формирования. Использование же тяжелых ионов приводит к созданию сильно связанной разупорядоченной области, слабо подверженной влиянию

поверхностных стоков, что наверняка позволяет сохранить в итоге приближенный вид профилей распределения первично-рожденных радиационных дефектов.

Важно иметь в виду, что структурирование вторичного дефектного фона в непосредственной близости от межфазной границы сильно подвержено влиянию стока дефектов из Si на границу раздела. В п.1.1.4 показано, что такие поверхностные стоки имеют разную эффективность для V и I. С точки зрения значений релаксационных объемов точечных дефектов для кристалла наиболее выгоден уход на межфазную границу V. Это означает, что при термическом отжиге структур «диэлектрик-Si» сепарирование V из кремниевой решетки должно усиливаться еще и за счет преимущественного стока V на межфазную границу, обеспечивая еще более высокие пересыщения Si по I. В случае КНИ-структуры наличие сразу двух границ должно способствовать более интенсивному и направленному стоку вакансий, что будет приводить к понижению пересыщений Si по V.

## **2.2. Экспериментальные исследования эффекта в структуре SiO<sub>2</sub>-Si**

Экспериментальные исследования эффекта устойчивого интегрального разделения накопленных после радиационных воздействий I и V в структуре SiO<sub>2</sub>-Si включали методы рентгеновской дифрактометрии и обратного резерфордского рассеяния, традиционно применяющиеся в задачах диагностики структурных нарушений в решетке кристаллов.

### **2.2.1. Экспериментальные и контрольные структуры**

Объектом исследований являлась экспериментальная структура SiO<sub>2</sub>-Si, в качестве контрольного образца выступал монокристалл Si той же спецификации, что и в составе структуры SiO<sub>2</sub>-Si. Кремний имел ориентацию (100) и удельное электрическое сопротивление 1мОм-см. Толщина слоя SiO<sub>2</sub> составляла 30нм. С целью оценки вклада влияния граничных эффектов на перераспределение дефектов в приповерхностной области Si, было изготовлено два типа экспериментальных структур: пленка SiO<sub>2</sub> формировалась путем термического

окисления и методом PECVD. Термическое окисление проводилось в сухой среде при  $T=920^{\circ}\text{C}$ , что обуславливает возникновение в Si растягивающих механических напряжений порядка 200МПа. Метод PECVD отличает то, что в этом процессе удастся сформировать пленки  $\text{SiO}_2$  в отсутствие механических напряжений, что и было реализовано в настоящей работе.

Исследуемые структуры облучались инертными ионами  $\text{Kr}^+$  с энергией 40кэВ и дозой  $10^{13}\text{см}^{-2}$  под углом  $7^{\circ}$ . Тип ионов имеет немаловажное значение в вопросе интерпретации результатов исследований. Криптон сочетает в себе достоинства тяжелого иона, обсужденные раньше, и химически-нейтрального компонента, не оказывающего влияния на перераспределение точечных дефектов. Выбор энергии ионов обусловлен локализацией среднего проецированного пробега ионов в области границы раздела фаз структуры  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , что определено на основании расчетов SRIM (рис. 2а).

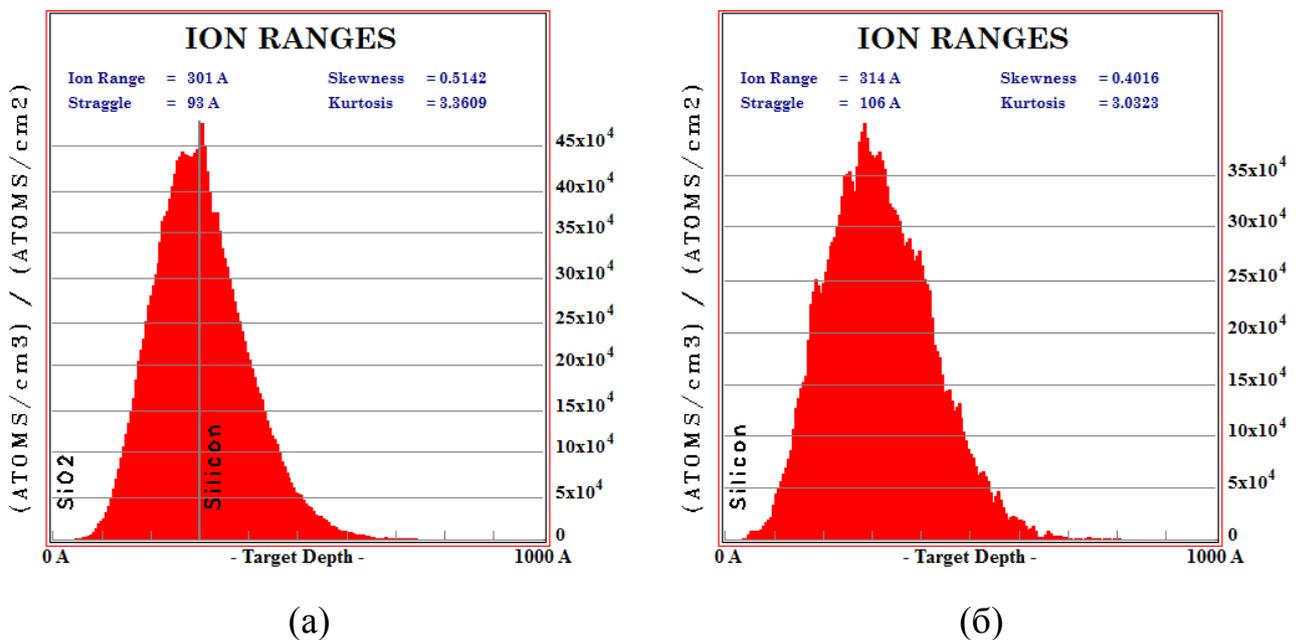


Рисунок 2.4. Результаты моделирования в программной среде SRIM распределения ионов криптона, имплантированных в структуру  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  (а) и кремний (б)

Доза имплантации имеет доаморфизационное значение, что является требованием к применимости используемых методов диагностики радиационных дефектов.

Модельный ионно-имплантированный профиль распределения Кг в контрольном образце Si также представлен на рис. 2.4 (б).

### 2.2.2. Исследование профилей распределения деформации решетки кремния методами рентгеновской дифрактометрии

Дефектность ионно-имплантированных слоев исследовалась методом рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения. Рентгенодифракционные измерения выполняли на дифрактометре D8 Discover (Bruker-AXS, Германия) (рис. 2.5).



Рисунок 2.5. Внешний вид дифрактометра D8 Discover (Bruker-AXS)

Источником рентгеновского излучения являлась рентгеновская трубка мощностью 1,6 кВт с медным анодом. Параллельный пучок формировали зеркалом Гебеля. В использованной схеме высокого разрешения с помощью четырехкратного щелевого монохроматора Ge(022) с конфигурацией кристаллов ( $n$ ;  $+n$ ) вырезали  $\text{CuK}\alpha_1$ -составляющую излучения (длина волны  $\text{CuK}\alpha_1 = 0,15406$  нм). Ширина инструментальной функции прибора в этой схеме составляет 12 угл. с. Интенсивность дифрагированного пучка измеряли позиционно-чувствительным детектором LynxEye (Bruker-AXS) с угловым разрешением  $0,014^\circ$ . Измерения карты обратного пространства в окрестности узла обратной решетки Si(004) были проведены в режиме 1D детектора при ширине падающего пучка 0,05 мм. Кривые дифракционного отражения (КДО) Si(004) были измерены в режиме  $\omega$ - $2\theta$

сканирования. По форме КДО, используя оригинальную оптимизационную процедуру [60], основанную на алгоритме дифференциальной эволюции, было получено распределение структурных дефектов по глубине слоя. Они описываются распределением по глубине  $z$  двух параметров: деформации в направлении нормали к поверхности образца  $\varepsilon_{zz}(z)$  и статического фактора Дебая—Валлера  $L_H(z)$ .  $L_H$  определяется среднеквадратическим смещением  $\langle u^2 \rangle$  атомов из их узлов в деформированной кристаллической решетке и зависит от размера и числа кластеров первичных дефектов.

Для случая симметричного отражения Si(004) в соответствии с [20] могут быть определены  $Z$ -компоненты  $\varepsilon_{zz}$  и  $L_H$ :

$$L_H = \frac{8\pi\sqrt{2\pi}}{15V} h^{3/2} \cdot q_v^{3/2} \cdot c_{cl} \cdot \Delta V^{3/2} \quad (2.2)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{1}{3} q_v \cdot c_{cl} \cdot \frac{\Delta V}{V} \quad (2.3)$$

где  $h$  — вектор дифракции;  $V$  — объем элементарной ячейки;  $q_v$  — коэффициент анизотропии, равный  $C_{11}/(C_{11} + 2C_{12})$  для направления [001] в кристаллах кубической сингонии (где  $C_{ij}$  — компоненты тензора упругости);  $c_{cl}$  — относительная концентрация кластеров;  $\Delta V/V$  — удельное изменение объема кристалла при введении в него одного кластера.

Выражая из (2.2) и (2.3)  $c_{cl}$  и  $\Delta V/V$  можно получить удобные для расчета выражения:

$$c_{cl} \approx 6.6 \cdot 10^4 \frac{\varepsilon_{zz}^3}{L_H^2} \quad (2.4)$$

$$\frac{\Delta V}{V} \approx 3.1 \cdot 10^{-5} \frac{L_H^2}{\varepsilon_{zz}^2} \quad (2.5)$$

Принимая во внимание значительное количество дефектов Френкеля, образующихся во время имплантации ионов Кг в кремний, можно ожидать присутствия растягивающих деформаций в нарушенном слое. Это подтверждается формой КДО для исследованных образцов (рис. 2.6). Максимум,

соответствующий средней деформации слоя, находится слева от пика подложки в области меньших углов. Интенсивность этого максимума выше для случая имплантации в чистый кремний, поскольку толщина рассеивающего кристаллического слоя больше при имплантации в чистый кремний. При имплантации в структуру  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  сохраняется асимметрия КДО в сторону отрицательных отклонений от брегговского положения пика подложки, что свидетельствует о рассеянии преимущественно межузельными дефектами.

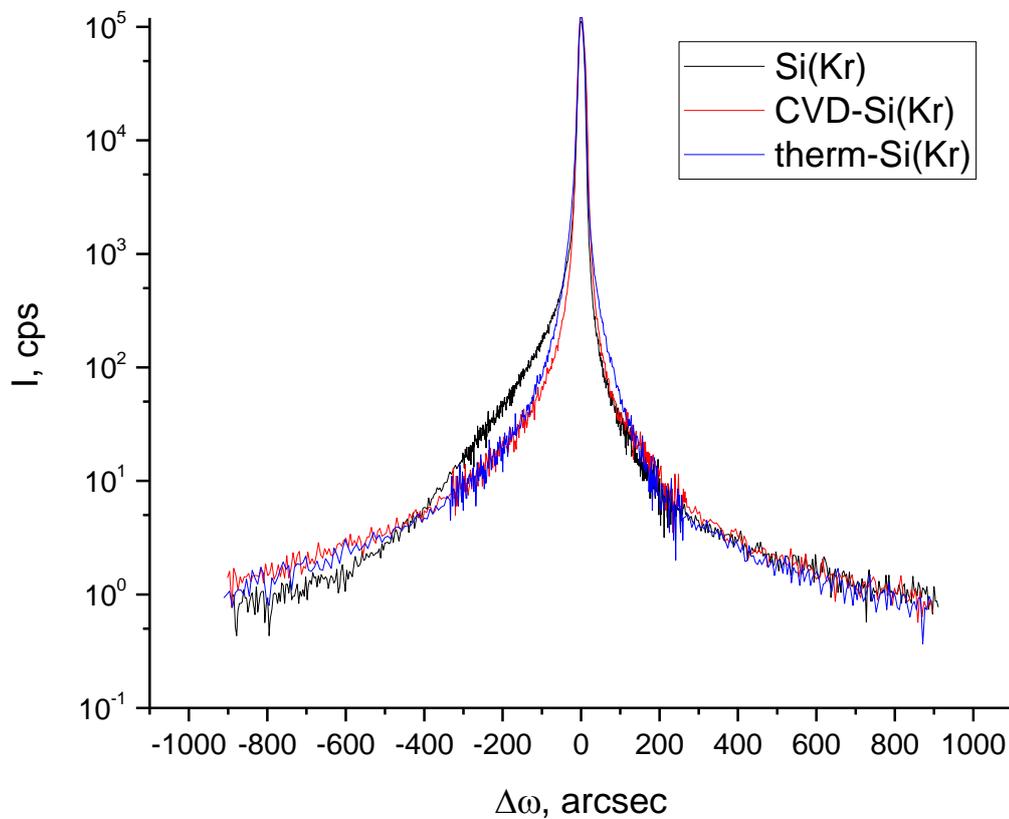


Рисунок 2.6. Кривые дифракционного отражения (КДО), измеренные в окрестности узла обратной решетки  $\text{Si}(004)$  для структур  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  и  $\text{Si}$ . По оси абсцисс отложен угол отклонения от точного брегговского положения для отражения  $\text{Si}(004)$ .

Причиной асимметрии КДО может являться и диффузное рассеяние рентгеновских лучей (ДРРЛ) на кластерах радиационных дефектов. Чтобы разделить вклад рассеяния на матрице с большим периодом решетки и на

кластерах дефектов, были проведены измерения карт обратного пространства в окрестности узла Si(004) (рис. 2.7). Измеренные КДО соответствуют сечению вдоль оси  $q_z$  на карте.

Локализация распределения интенсивности в обратном пространстве в окрестности оси  $q_z$  указывает на то, что асимметрия КДО вызвана рассеянием на слое с периодом решетки большим, чем период решетки кремния, из-за присутствия межузельных дефектов, растворенных в матрице. Интенсивность ДРРЛ, которое размыто в виде широкого гало вокруг узла, выше для случая имплантации в чистый кремний (рис. 2.7а), что свидетельствует как о большем объеме рассеивающего слоя, так и о присутствии кластеров радиационных дефектов. Оба эти фактора преобладают в случае имплантации в чистый кремний. Но вклад ДРРЛ в интенсивность КДО мал.

В случаях имплантации в структуру с оксидными слоями наблюдается преобладание междоузельных атомов в кристаллической решетке кремния. Наряду с этим следует отметить наличие приповерхностного слоя толщиной 2-3 нм, обогащенного вакансионными дефектами. Это, возможно, связано с тем, что оксидный слой является источником как упругих, так и электрических полей. Фактор  $\exp(-L_H)$  слабо отличается от 1 по всей глубине нарушенного слоя кремния, что свидетельствует о слабой ассоциации радиационных дефектов.

Проведем оценки концентраций растворенных межузельных дефектов для двух типов структур на глубине 33 нм, что соответствует расстоянию примерно 3 нм от границы SiO<sub>2</sub>-Si в структуре с оксидным слоем, где наблюдается максимум деформации.

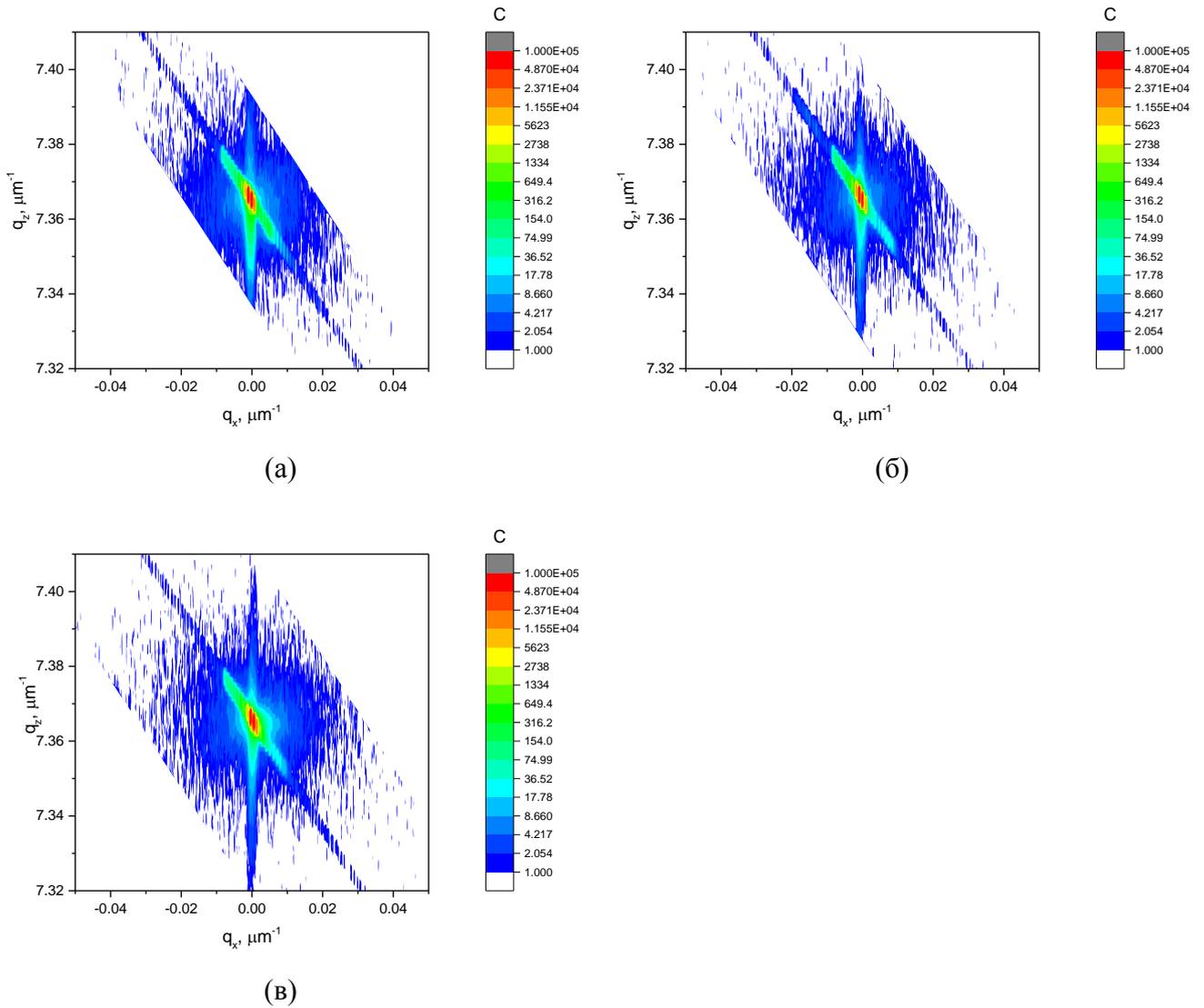
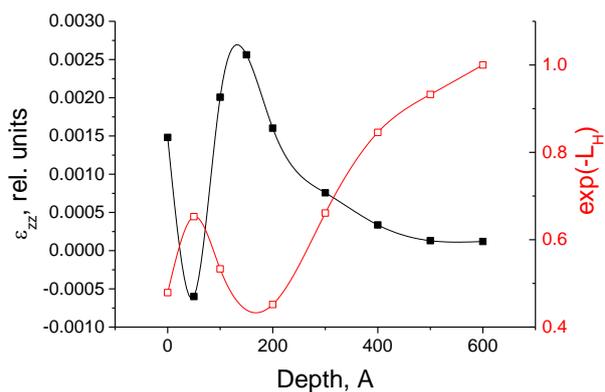
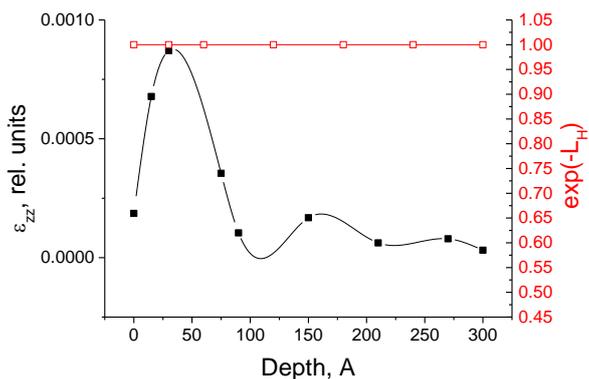


Рисунок 2.7. Карты обратного пространства, измеренные в окрестности узла Si(004) обратной решетки, для контрольного образца Si (а) и экспериментальных структур SiO<sub>2</sub>(PECVD)-Si (б) и SiO<sub>2</sub>(терм.)-Si (в)

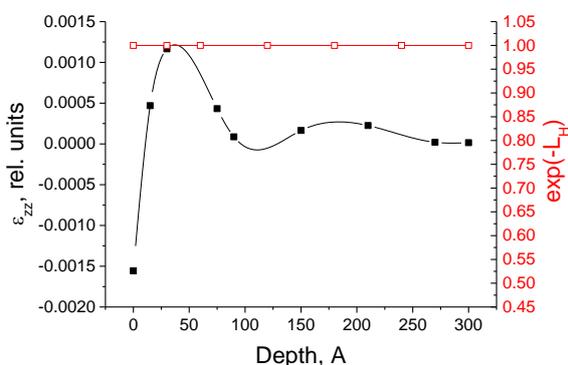
Оценки, сделанные по формуле (2.4) для Si и (2.3) для экспериментальных структур дают значение относительной концентрации межузельных дефектов в диапазоне  $2-4 \times 10^{-3}$ . Это указывает на то, что экспериментальная и контрольная структуры различаются только степенью агломерации радиационных дефектов. В случае имплантации в кремний дефекты формируют скопления порядка 75 межузлий на кластер. Следует отметить, что эти оценки сделаны для области с малыми деформациями (порядка  $\varepsilon_{zz}=0.0005$ ) и ошибка в значении степени агломерации межузельных атомов может быть высока.



(a)



(б)



(в)

Рисунок 2.8. Профили распределения деформации  $\varepsilon_{zz}(z)$  (■) и показателя экспоненты статического фактора Дебая-Валлера  $L_H(z)$  (□) для подложки Si(001) (a), структур SiO<sub>2</sub>(PECVD)-Si (б) и SiO<sub>2</sub>(терм.)-Si (в) имплантированных ионами Kr<sup>+</sup>. На рисунках (б) и (в) ноль по оси абсцисс соответствует положению границы SiO<sub>2</sub>-Si.

На рис. 2.9 приведено сравнение глубинных профилей распределения структурных дефектов в ионно-имплантированных слоях структуры SiO<sub>2</sub>-Si и монокристалла Si. Распределение I в кремниевой решетке структуры SiO<sub>2</sub>-Si хорошо накладывается на хвост распределения дефектов в монокристалле Si, что подтверждает модельные представления в части распределения интенсивности генерации радиационных дефектов в многослойных структурах. Небольшое отклонение от этой зависимости в области межфазной границы, по-видимому, связано со снижением рекомбинационных процессов в этой области, вызванным стоком радиационных вакансий в поверхностную область Si.

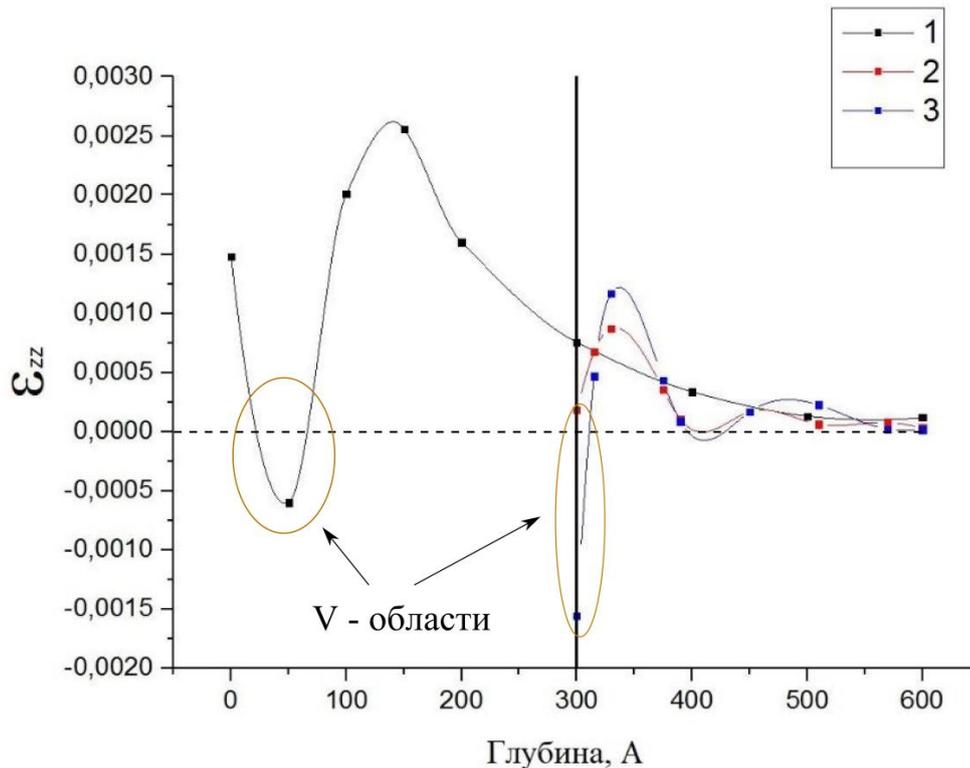


Рисунок 2.9. Профили распределения деформации по глубине ионноимплантированных слоев экспериментальных образцов (2 – SiO<sub>2</sub>(PECVD) - Si, 3 - SiO<sub>2</sub> (терм.)-Si) и контрольного кристалла Si (1)

Анализируя поведение первичных дефектов в структурах SiO<sub>2</sub>(PECVD)-Si и SiO<sub>2</sub>(терм.)-Si, определено отсутствие влияния упругих полей на характер перераспределения дефектов в области межфазной границы.

### 2.2.3. Анализ распределений радиационных дефектов методом RBS

Исследования выполнялись на установке ионной имплантации и анализа на базе ускорителя Ван де Грааф K2MV (HVEE), входящей в состав центра коллективного пользования научным оборудованием «Диагностика микро- и наноструктур» на базе Ярославского филиала ФТИАН (рис. 2.10).

Известно, что чувствительность RBS к легким элементам мишени, коим является и Si, достаточно плохая. Значительно повысить восприимчивость к собственным дефектам кристаллической решетки Si становится возможным за счет эффекта каналирования. Сравнивая спектры рассеяния, полученные при облучении вдоль направлений кристаллографических осей и вдоль случайных

направлений, можно получить информацию о несовершенстве кристаллической решетки образца.



Рисунок 2.10. Приемная камера для исследований методом резерфордовского обратного рассеяния на базе ускорителя Ван де Граафа K2MV (HVEE)

Спектры обратного резерфордовского рассеяния (РОР) были получены с использованием ионов  $\text{He}^+$  с энергией  $E = 800$  кэВ. Рассеянные ионы регистрировались под углом  $\varphi = 110^\circ$  к падающему лучу. Спектры РОР каналированных ионов регистрировались в направлении оси  $\langle 100 \rangle$ , что соответствовало нормальному падению ионного луча на образец (т.е. угол входа луча  $\alpha = 0^\circ$  и угол выхода луча из образца  $\beta = 70^\circ$ ). Разориентированные спектры РОР регистрировались при наклоне образца вокруг вертикальной оси на угол  $\theta_y = 7^\circ$  и вокруг горизонтальной оси на угол  $\theta_z = 5^\circ$ , что соответствовало углу входа луча в образец  $\alpha = 8,6^\circ$  и углу выхода луча  $\beta = 63,1^\circ$ . Упрощенная схема эксперимента проиллюстрирована на рис. 2.11.

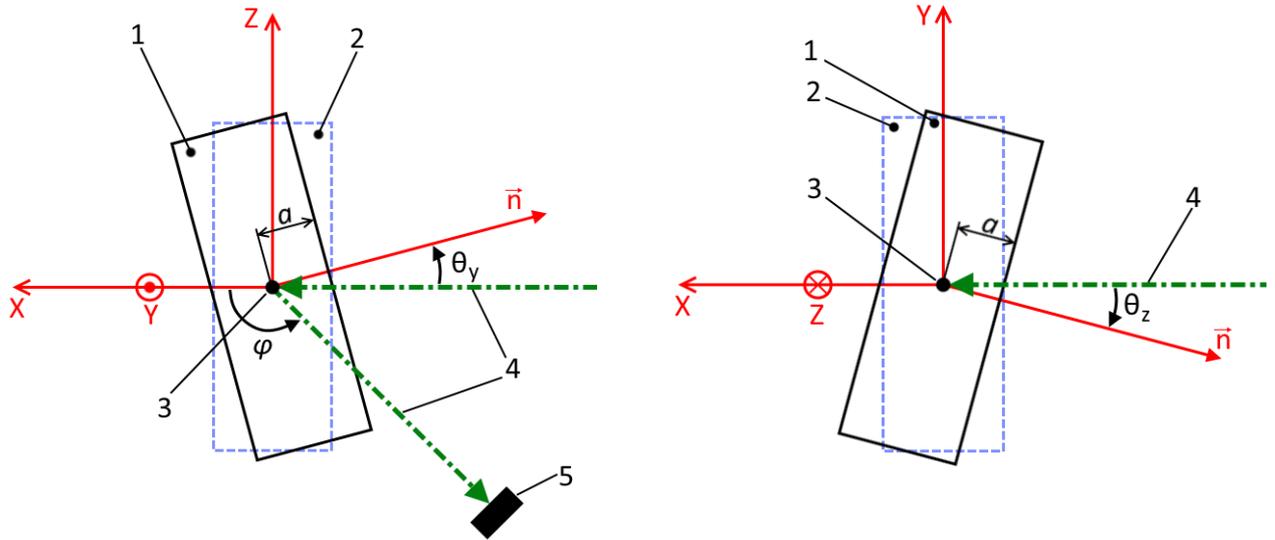


Рисунок 2.11. Ориентация образца относительно ионного луча и детектора: (а) – вид сверху; (б) – вид со стороны детектора. Цифрами обозначено: 1 – образец; 2 – начальное положение образца (нормальное падение луча); 3 – атом, на котором происходит рассеяние; 4 – ионный луч; 5 – детектор;  $n$  – нормаль образца

В сущности, методика исследования сводится к оценке разности интенсивности выхода ориентированных спектров идеального кристалла и кристалла с дефектами. Но поскольку экспериментально невозможно разделить выход от кристалла с дефектами на фракцию, обусловленную непосредственным рассеянием на дефектах, и фракцию, обусловленную выходом от деканализовавших ионов, то использовался метод последовательных итераций со ступенчатым приближением вероятности деканализования по глубине образца. Определение функции концентрации дефектов по глубине было проведено на основании методики расчёта, предложенной в [61].

Согласно использованной модели выход обратно рассеянных каналированных ионов с глубины  $x$  образца складывается из двух компонент:

$$\chi(t) = \chi_R(t) + (1 - \chi_R(t)) \cdot \frac{N_D(t)}{N}, \quad (2.6)$$

где  $\chi_R(t)$  – выход, обусловленный деканализовавшей частью ионного луча, второе слагаемое – выход каналированного луча непосредственно на дефектах,  $N_D(t)$  –

концентрация дефектов на глубине  $t$ ,  $N$  – атомная плотность образца. В свою очередь, выход от деканализовавшей части ионов можно представить в следующем виде:

$$\chi_R(t) = \chi_V(t) + (1 - \chi_V(t)) \cdot P(t), \quad (2.7)$$

где  $\chi_V(t)$  – выход естественного деканализования с глубины  $t$  (то есть значение выхода для кристалла без дефектов),  $P(t)$  – вероятность деканализования каналированных ионов на пути от поверхности образца до глубины  $t$ . Вероятность деканализования в свою очередь также зависит от функции концентрации дефектов по пути следования ионов. Для малых глубин залегания дефектов (приближение однократных рассеяний) её можно определить следующим образом:

$$P(t) = 1 - \exp\left(-\int_0^t \sigma_D(E) N_D(t) dt\right), \quad (2.8)$$

где сечение деканализования на дефекте определяется как:

$$\sigma_D(E) = 3,53 \cdot 10^{-15} \cdot \frac{Z_I Z_A d}{E F_{RS}^2}, \quad (2.9)$$

где  $d$  – расстояние между атомами вдоль направления каналирования,  $E$  – энергия летящего иона,  $F_{RS}$  – безразмерный коэффициент, характеризующий средний межатомный потенциал для движущегося иона (может быть оценен на основе теории теплоёмкости Дебая). При каналировании ионов в Si вдоль кристаллографической оси  $\langle 100 \rangle$  расстояние между атомами в канале равно параметру решётки  $d = 5,4307 \text{ \AA}$ .

Выход обратно рассеянных каналированных ионов и естественного деканализования определялся экспериментальным путем через следующие соотношения:

$$\chi = \frac{N.Y.(\text{Implanted aligned})}{N.Y.(\text{Random})}, \quad (2.10)$$

$$\chi_v = \frac{N.Y.(Virgin\ aligned)}{N.Y.(Random)}, \quad (2.11)$$

где  $N.Y.(Implanted\ aligned)$  – интенсивность ориентированного спектра РОР имплантированного образца,  $N.Y.(Virgin\ aligned)$  – интенсивность ориентированного спектра РОР неимплантированного образца, а  $N.Y.(Random)$  – интенсивность разориентированного спектра РОР имплантированного образца.

На рис. 2.12–2.14 представлены экспериментальные профили  $N.Y.(Random)$  (красные маркеры),  $N.Y.(Implanted\ aligned)$  (синий профиль) и  $N.Y.(Virgin\ aligned)$  (розовый профиль) образцов Si, SiO<sub>2</sub>(терм.)-Si и SiO<sub>2</sub>(PECVD)-Si. Вместе с ними приводятся модельные спектры, полученные при помощи программы SIMNRA v.7.01, а также численно определённый график деканализовавшей компоненты спектра РОР каналированных ионов в образце с дефектами  $\chi_R$  (красная пунктирная кривая).

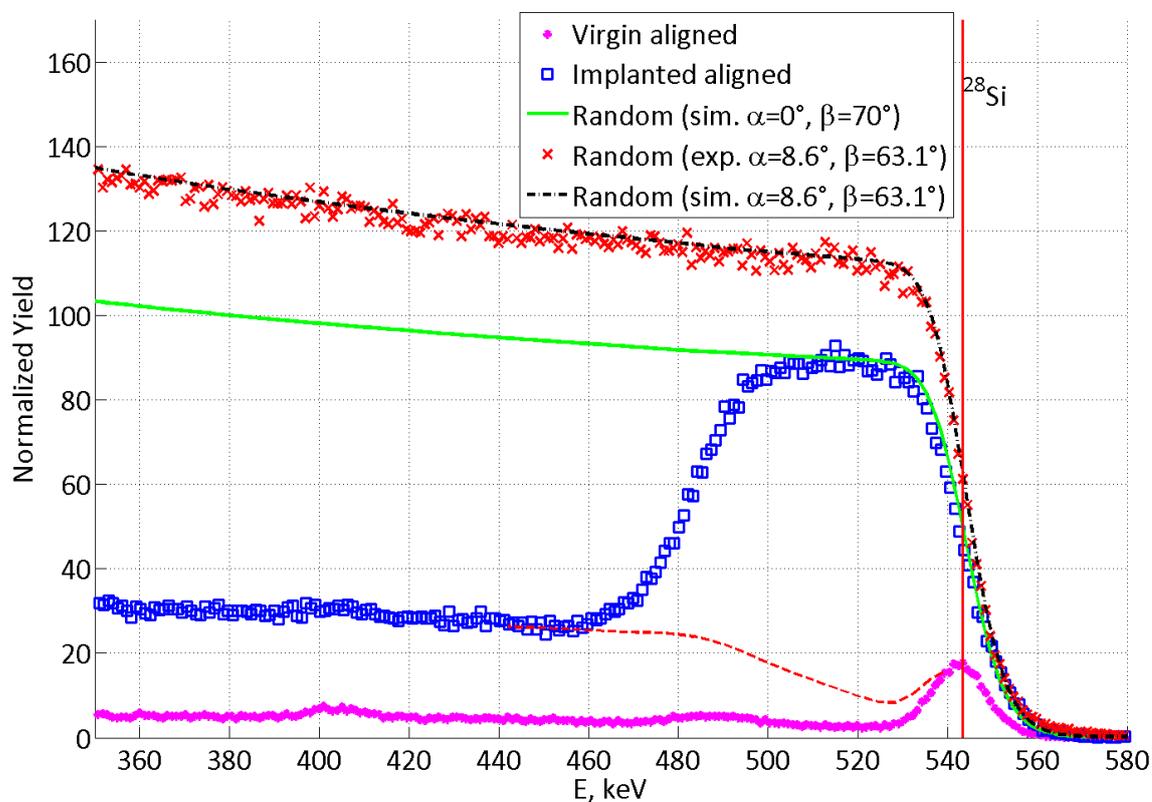


Рисунок 2.12. Экспериментальные и модельные спектры интенсивности выхода обратно рассеянных ионов, полученные на образце Si

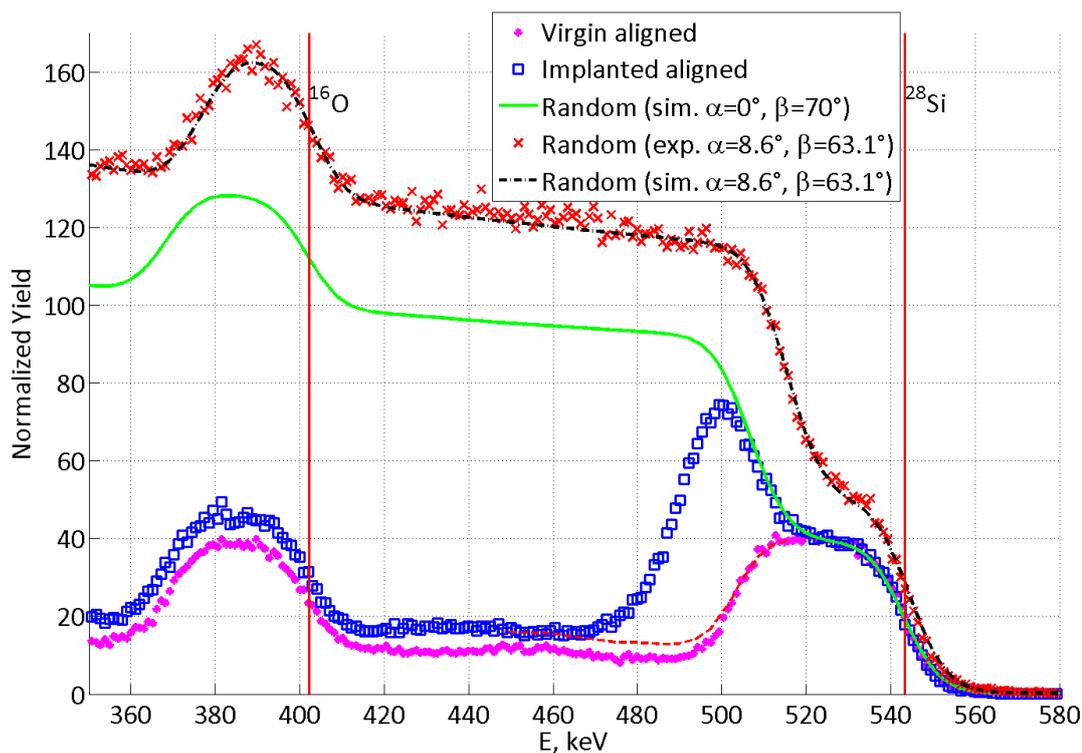


Рисунок 2.13. Экспериментальные и модельные спектры интенсивности выхода обратно рассеянных ионов, полученные на образце  $\text{SiO}_2(\text{терм.})\text{-Si}$

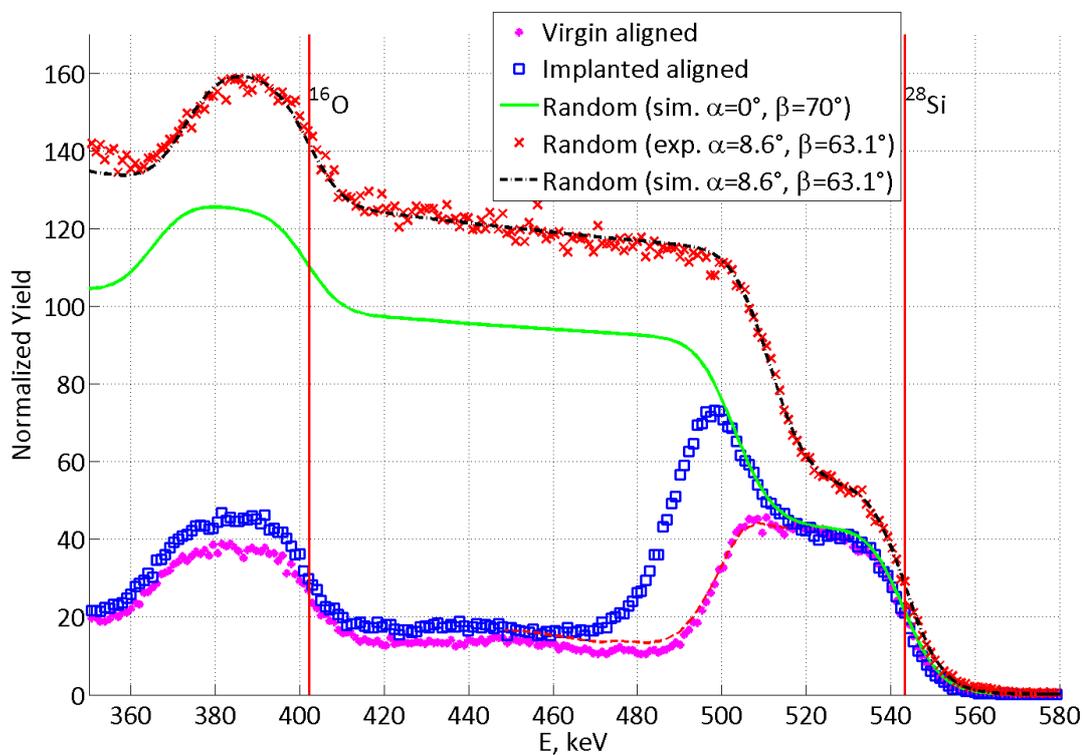


Рисунок 2.14. Экспериментальные и модельные спектры интенсивности выхода обратно рассеянных ионов, полученные на образце  $\text{SiO}_2(\text{PECVD})\text{-Si}$

При определении профиля дефектов переход от шкалы энергий к шкале глубин осуществлялся путём решения для каждой глубины интегрального уравнения:

$$E_R = K_A \left[ E_0 - \int_0^{t_{IN}} \varepsilon(E) dt \right] - \int_0^{t_{OUT}} \varepsilon(E) dt, \quad (2.12)$$

где  $E_R$  – значение энергии на спектре,  $\varepsilon$  – нормированные потери энергии движущимся ионом  $\text{He}^+$  в мишени,  $t_{IN}$  – эффективный путь, проходимый ионом до акта рассеяния,  $t_{OUT}$  – эффективный путь, проходимый ионом после акта рассеяния. Интегрирование здесь ведётся вдоль пути движения иона в образце. Значение функции энергетических потерь  $\varepsilon$  рассчитывалось при помощи программы SRIM-2013.

Диссипативные потери в веществе можно разложить в ряд Тейлора возле начальной энергии зондирующих ионов, что позволяет перейти к более простой форме определения энергии по глубине:

$$E_D(E_x, x) = E_x - x \cdot \varepsilon_x + \frac{1}{2} \cdot x^2 \cdot \varepsilon_x \cdot \varepsilon'_x - \frac{1}{6} \cdot x^3 \cdot (\varepsilon_x'' \cdot \varepsilon_x^2 + \varepsilon_x'^2 \cdot \varepsilon_x). \quad (2.13)$$

Здесь введены обозначения:

$$\varepsilon_x = \varepsilon(E_x), \quad \varepsilon'_x = \left. \frac{d\varepsilon}{dE} \right|_{E=E_x}, \quad \varepsilon_x'' = \left. \frac{d^2\varepsilon}{dE^2} \right|_{E=E_x}.$$

Следовательно, интегральное уравнение (10) можно переписать в виде:

$$E_R = E_D [K_A \cdot E_D(E_0, t_{IN}), t_{OUT}]. \quad (2.14)$$

Для двуслойной мишени это выражение принимает вид:

$$E_R = E_D^Q \left[ E_D^{Si} \left\{ K_A \cdot E_D^{Si} \left\langle E_D^Q(E_0, t_{BORD.IN}), t_{IN} - t_{BORD.IN} \right\rangle, t_{OUT} - t_{BORD.OUT} \right\}, t_{BORD.OUT} \right], \quad (2.15)$$

где  $E_D^Q$  отличается от  $E_D^{Si}$  только функцией  $\varepsilon$ , а  $t_{BORD.}$  – глубина залегания границы разделения  $\text{SiO}_2$  и  $\text{Si}$ .

Считая плотность  $\text{SiO}_2$  равной  $N_Q = 6,975 \cdot 10^{22}$  ат./см<sup>3</sup>, а плотность  $\text{Si}$  равной  $N_{Si} = 4,976 \cdot 10^{22}$  ат./см<sup>3</sup>, можно перейти от нормированной глубины к реальной.

Для образцов из монокристаллического кремния этот переход осуществляется следующим образом:

$$d = \frac{t}{N_{Si}}, \quad (2.16)$$

а для образцов, покрытых сверху плёнкой  $\text{SiO}_2$ , следующим образом:

$$d = \frac{t - t_{BORD.}}{N_{Si}} + \frac{t_{BORD.}}{N_Q}. \quad (2.17)$$

Профили распределения дефектов по глубине в экспериментальных и контрольном образцах представлены на рис 2.15. Из-за большей тормозной способности слоя  $\text{SiO}_2$  по отношению к Si, профиль распределения дефектов в кремниевой решетке структур  $\text{SiO}_2$ -Si на  $0.3R_p$  сдвинут ближе к поверхности. Профиль структурных дефектов в экспериментальных структурах, различающихся свойствами межфазной границы, практически идентичен. Т.е. подтверждаются выводы рентгеновской дифрактометрии в части того, что влиянием упругих полей границы на характер перераспределения дефектов во время облучения можно пренебречь. Более того, наклон в области хвоста распределения дефектов не зависит от того, происходило ли облучение в голую поверхность кристалла или через маскирующий слой. То есть появление межфазной границы не способствует повышению эффективности стока дефектов. По-видимому, это связано с тем, что скорость процессов кластеризации дефектов во время облучения преобладает над скоростью их диффузионного растаскивания. И, в таком случае, с большой долей вероятности можно считать, что ситуация не изменится при смене маскирующего слоя на другой диэлектрический материал, например,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  или TiN.

Следует также обратить внимание, что наличие экспериментальных точек в аморфных слоях  $\text{SiO}_2$  объясняется рассеянием ионов  $\text{He}^+$  на пути в детектор и размытием сигнала измерительным трактом.

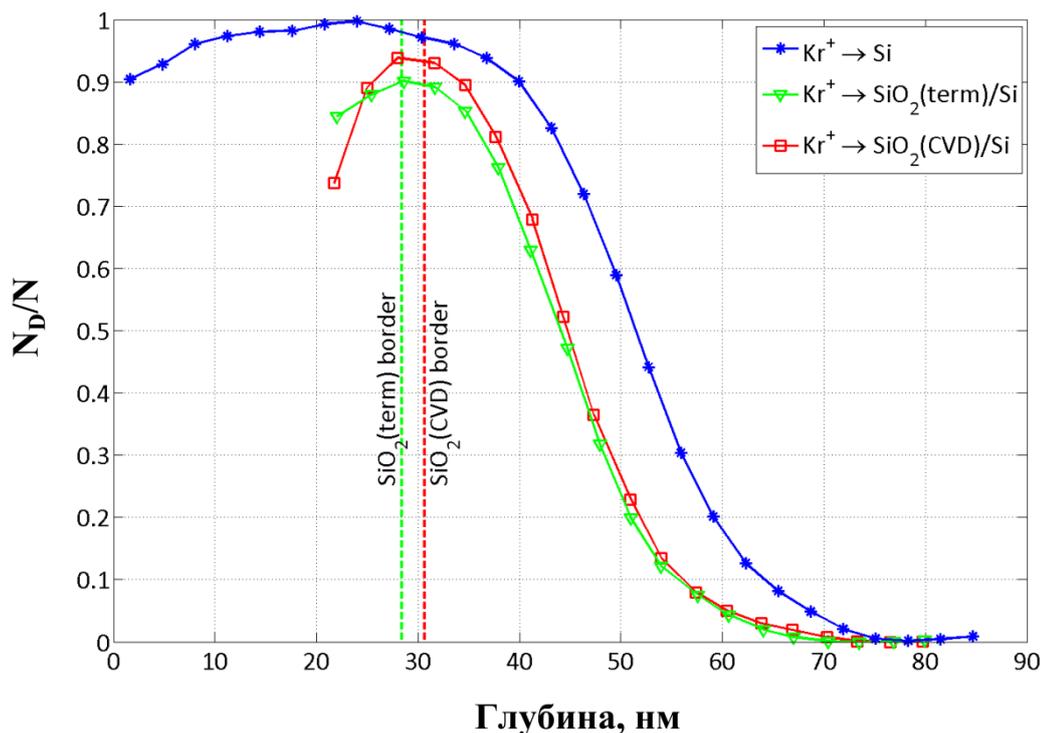
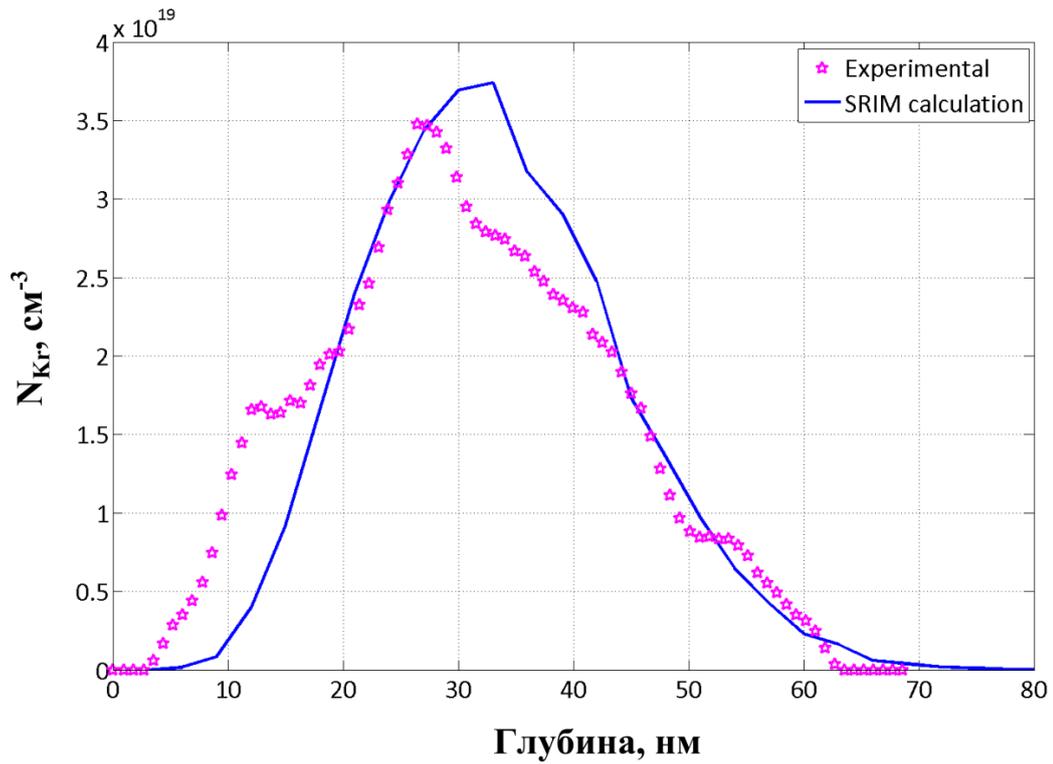


Рисунок 2.15. Глубинные профили распределения структурных дефектов в образцах Si, SiO<sub>2</sub>(PECVD)–Si и SiO<sub>2</sub>(терм.)–Si, имплантированных Kr<sup>+</sup> с энергией 10кэВ и дозой 10<sup>14</sup> см<sup>-2</sup>

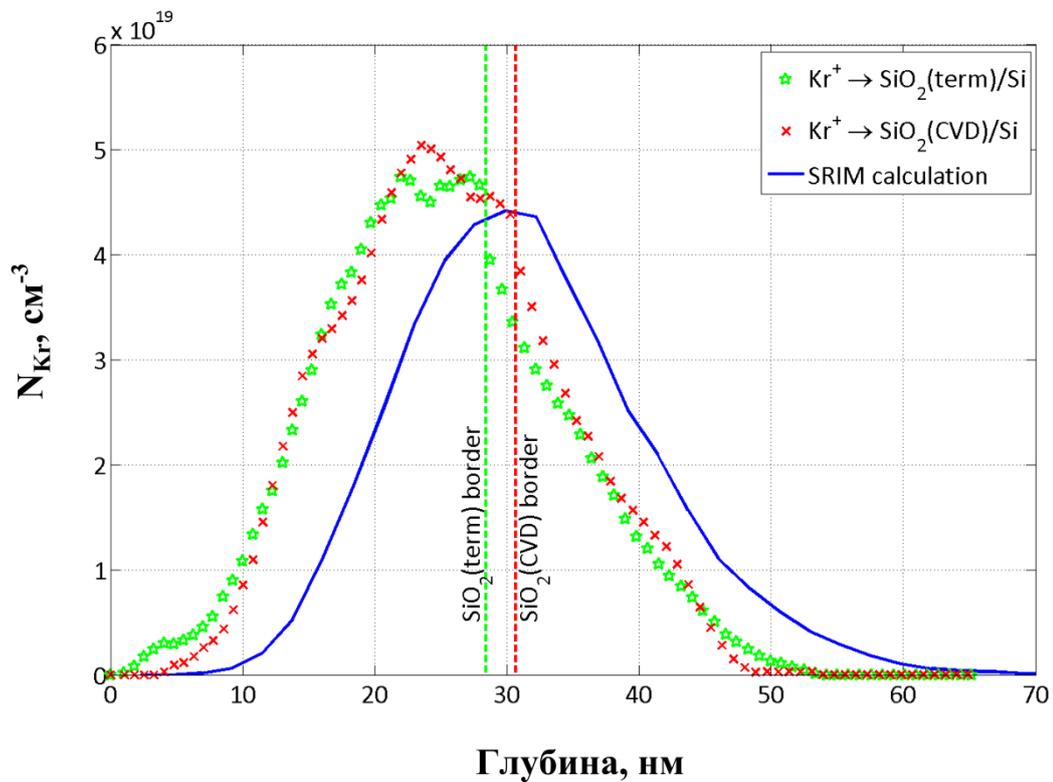
Кроме того, методами RBS во всех образцах был определен профиль распределения Kr<sup>+</sup> по глубине. Нормированный выход РОР от Kr (в приближении его малой концентрации) при нормальном падении луча на образец может быть представлен следующим образом:

$$N \cdot Y_{Kr} = \frac{\sigma_{Kr}(E_t) \cdot N_{Kr}}{N_{Si} \cdot \left( K_{Kr} \varepsilon_{Si}(E_t) + \frac{\varepsilon_{Si}(K_{Kr} E_t)}{|\cos \varphi|} \right)}, \quad (2.18)$$

где  $E_t$  – энергия иона He<sup>+</sup> на глубине  $t$  (до столкновения с атомом),  $\sigma_{Kr}$  – сечение рассеяния криптона,  $K_{Kr}$  – кинематический фактор криптона,  $N_{Kr}$  – атомная концентрация криптона на глубине  $t$ ,  $\varepsilon_{Si}$  – удельные энергетические потери в мишени. Переход от шкалы энергий к шкале глубин производился аналогично тому, как это осуществлялось для профиля дефектов. Профиль распределения Kr в исследуемых структурах представлен на рис. 2.16 (а,б).



(a)



(б)

Рисунок 2.16. Экспериментальные и модельные (SRIM) профили распределения Kr по глубине, имплантированного в монокристаллический Si (а) и структуры SiO<sub>2</sub>-Si (б)

В ситуации с монокристаллическим Si модельный профиль распределения Kr в хорошей степени совпадает с экспериментальным, а вот в случае структур SiO<sub>2</sub>-Si отличие достаточно существенное. Модельно определенные условия имплантации в части локализации R<sub>p</sub> в области межфазной границы в действительности не выполнены. Фактическая глубина залегания границы раздела фаз находится глубже R<sub>p</sub> примерно на 30% от его величины. Но, несмотря на то, что исследование распределения дефектов велось в области хвоста профиля, это не умаляет важности полученных выводов в части взаимодействия дефектов с границей, поскольку влияние границы на поведение I, и V в приповерхностной области Si достаточно высокое.

Интегрирование полученных профилей даёт значение общей дозы криптона для каждого из образцов близкое к  $1 \cdot 10^{14}$  ат./см<sup>2</sup>, что соответствует реальной дозе имплантации.

### **2.3. Экспериментальные исследования эффекта устойчивого разделения пар Френкеля в гетероструктурах Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-Si и TiN-Si**

Верификация эффекта устойчивого разделения компонентов дальних пар Френкеля только лишь на структуре SiO<sub>2</sub>-Si не позволяет распространить действие эффекта на более широкий класс структур. Для придания подобной общности необходимы более обширные экспериментальные исследования, проведенные на целом ряде гетероструктур. Предметом исследований данного раздела являются частные примеры структур Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-Si и TiN-Si. Прежде всего, модельным путем определяются их геометрические параметры и параметры имплантации, а затем приводятся результаты их исследования методом рентгеновской дифрактометрии.

#### **2.3.1. Модельное определение параметров эксперимента**

Набор общих требований к структурам класса «диэлектрик-Si», определенных в п. 2.1.2, и совокупность традиционных материалов технологии Si микроэлектроники позволили выделить следующие типы гетероструктур

применительно к задачам устойчивого интегрального разделения радиационных I и V:  $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$  и  $\text{TiN-Si}$ . Нитрид кремния является ключевым материалом в технологии микроэлектроники, выполняя функции электрического изолятора и диффузионного барьера в интегральных схемах, и среды хранения заряда в устройствах памяти.  $\text{TiN}$  также является традиционным для  $\text{Si}$  микроэлектроники материалом и используется в технологии в качестве барьерного слоя для диффузии  $\text{Cu}$ . Низкая диффузионная прозрачность  $\text{TiN}$  наблюдается не только для атомов металлов, но и для собственных вакансий [62], что фактически и позволило отобрать данную структуру, не смотря на то, что это металл, и, формально, структура  $\text{TiN-Si}$  не принадлежит к классу «диэлектрик-Si».

Формирование экспериментальных структур с участием диэлектрической пленки  $\text{Si}_3\text{N}_4$  и металлического покрытия  $\text{TiN}$  проводилось в различных технологических процессах:  $\text{TiN}$  – атомно-слоевое осаждение,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  – метод PECVD. В ряде случаев в качестве контрольных образцов, по которым уже получены экспериментальные данные в параграфе 2.2, использовались структуры  $\text{SiO}_2\text{ – Si}$ , где пленки  $\text{SiO}_2$  – были выращены в процессе термического окисления. Используемая энергия имплантации составляла 50кэВ, а доза –  $8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ . Выбор такого высокого, предаморфизационного значения дозы обусловлен стремлением к повышению точности измерения величины деформации в кристаллической решетке  $\text{Si}$ . Критерием определения толщины маскирующих слоёв служило равенство интегральной концентрации вакансий, рожденных в кремниевой решетке структур, что вводило небольшую поправку на условие локализации  $R_p$  в области границы раздела фаз. Это позволяет однозначно связать изменение профиля деформации с изменением концентрации радиационных I в объёме  $\text{Si}$ . По расчётам профиля генерации первичных радиационных вакансий в  $\text{Si}$  фазе структур, проведенным в программной среде SRIM, были определены толщины маскирующих покрытий структур, способствующих созданию приблизительно единого уровня вакансионных пересыщений в кремниевой решетке: толщина  $\text{TiN}$  – 18нм, толщина  $\text{Si}_3\text{N}_4$  – 22нм, а толщина  $\text{SiO}_2$  – 30нм (рис.2.17). За начало отсчёта глубины принималось положение межфазной границы.

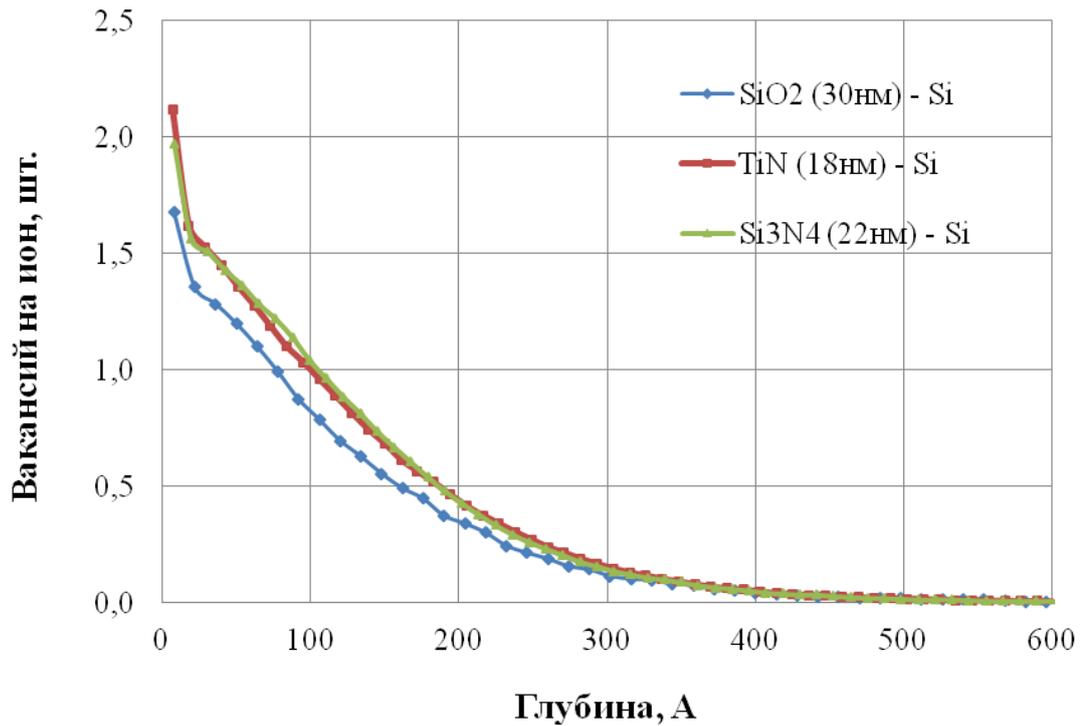


Рисунок 2.17. SRIM профили генерации первичных вакансий в кремниевой решетке структур  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ ,  $\text{TiN-Si}$  и  $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$

### 2.3.2. Исследование профилей распределения деформации решетки кремния методами рентгеновской дифрактометрии

Значение толщины маски каждой из структур контролировалось методами эллипсометрии и рентгеновской рефлектометрии. Профили распределения плотности по глубине маскирующих слоев, определенные последним из методов, представлены на рис. 2.18. Плотность пленки характеризует её тормозную способность для внедряемых ионов и определяет справедливость модельного расчёта концентрации первичных радиационных вакансий. Наиболее однородным по глубине является слой  $\text{SiO}_2$ . Толщина слоя  $\text{TiN}$  соответствует модельному значению, а вот его плотность несколько ниже табличного значения, соответствующего кристаллической фазе  $\text{TiN}$  ( $5.2 \text{ г/см}^3$ ). Однородность  $\text{Si}_x\text{N}_y$  довольно плохая – средняя плотность плёнки значительно ниже табличного значения ( $3.3 \text{ г/см}^3$ ).

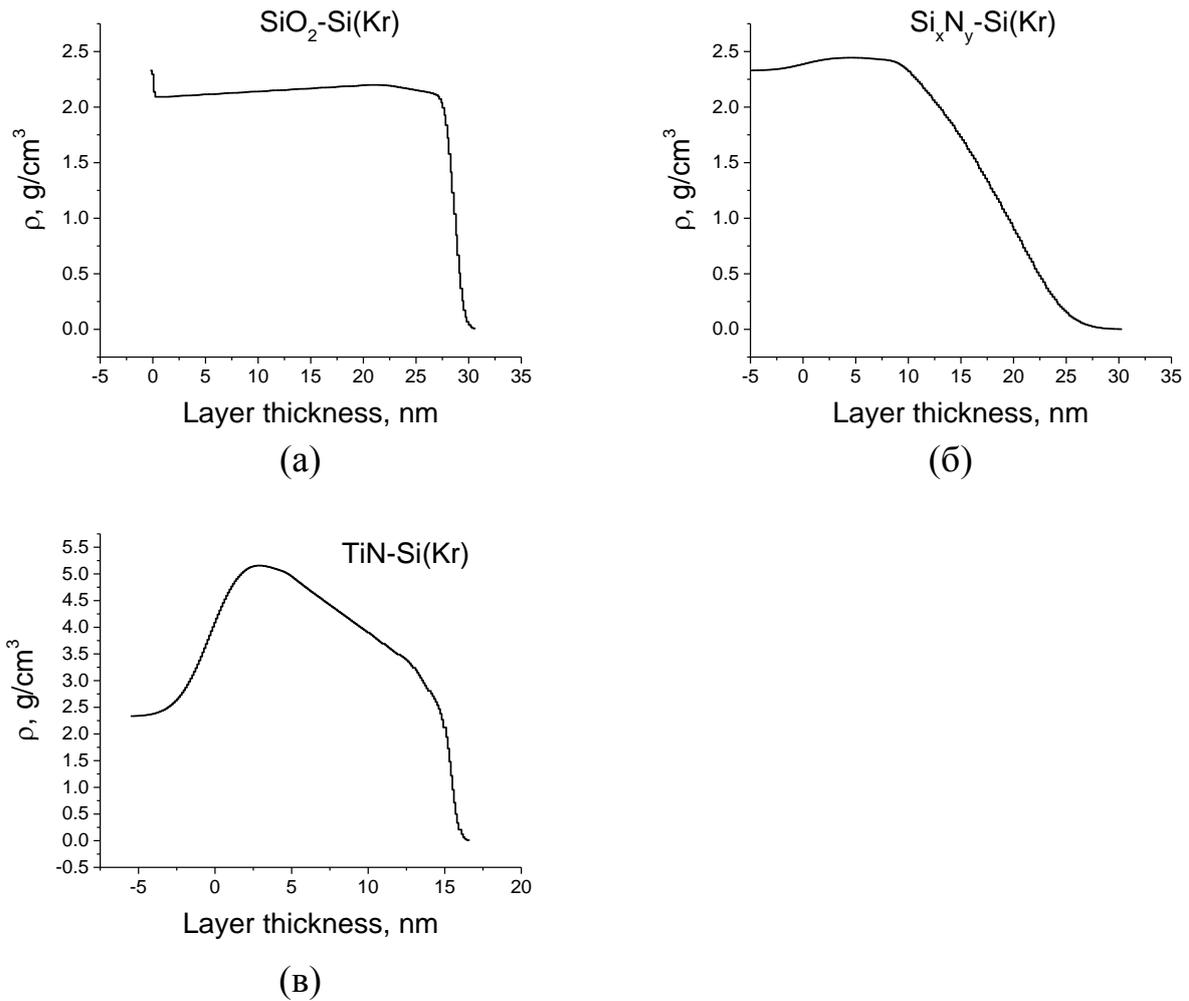


Рисунок 2.18. Профили распределения плотности по глубине маскирующих покрытий экспериментальных структур, определенные методом рентгеновской рефлектометрии

Рентгенодифракционные измерения выполняли на дифрактометре D8 Discover (Bruker-AXS, Германия) в режимах, описанных в п. 2.2.2. Кривые дифракционного отражения, измеренные для исследуемых структур, характеризуются сильной асимметрией в сторону отрицательных отклонений от брегговского положения пика подложки, что свидетельствует о рассеянии на слое с периодом решетки большим, чем период решетки кремния (рис. 2.19). Это свидетельствует о пересыщении объема Si по собственным междоузлиям, что подтверждает эффект устойчивого интегрального сепарирования радиационных вакансий и междоузлий. Следует также отметить, что увеличение степени

ассиметрии КДО по сравнению с исследованиями, описанными в п. 2.2.2, вызвано повышением дозы имплантации в 8 раз.

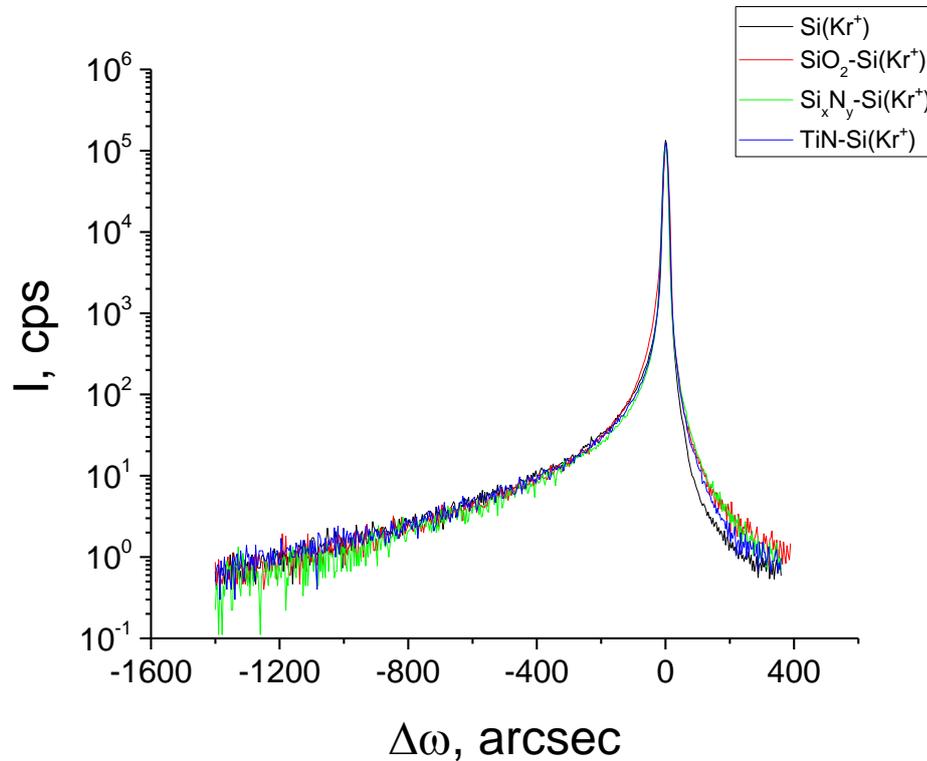


Рисунок 2.19. Кривые дифракционного отражения (КДО), измеренные в окрестности узла обратной решетки  $\text{Si}(004)$  для структур  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ ,  $\text{TiN-Si}$ ,  $\text{Si}_x\text{N}_y\text{-Si}$  и  $\text{Si}$ . По оси абсцисс отложен угол отклонения от точного брегговского положения для отражения  $\text{Si}(004)$ .

Поскольку ассиметрия КДО может являться следствием диффузного рассеяния на кластерах дефектов, то для всех структур были проведены измерения карт обратного пространства в окрестности узла обратной решетки  $\text{Si}(004)$  (рис. 2.20). Распределение интенсивности в направлении оси  $q_z$  обратного пространства указывает на то, что ассиметрия КДО обусловлена рассеянием на слое с увеличенным периодом решетки, что характеризует пересыщение дефектами междоузельного типа. По форме диффузного размытия гало видно, что вклад ДРРЛ в интенсивность КДО незначителен. Однако, следует отметить значительное усиление малоуглового рассеяния рентгеновских лучей для образца  $\text{Si}_x\text{N}_y\text{-Si}$ . По всей видимости, это является проявлением сильной неоднородности

фазового состава переходной области в области межфазной границы, способствующей формированию нанокристаллов Si различной ориентации непосредственно в области границы.

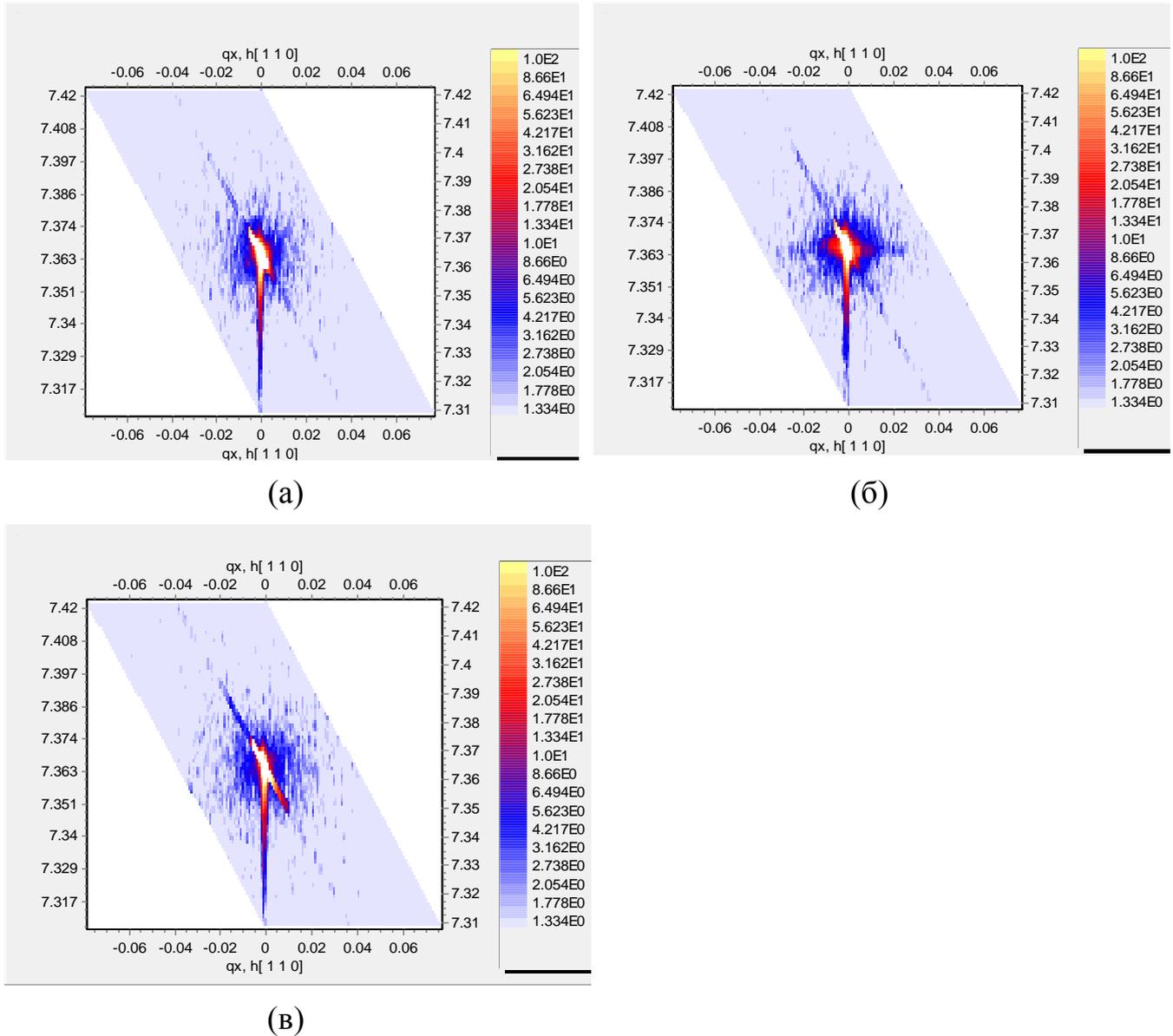


Рисунок 2.20. Карты обратного пространства, измеренные в окрестности узла Si(004) обратной решетки, для структур SiO<sub>2</sub>-Si (а), Si<sub>x</sub>N<sub>y</sub>- Si (б) и TiN- Si (в)

На рис. 2.21 для исследуемых структур представлены профили распределения деформации  $\varepsilon_{zz}(z)$  и экспоненты статического фактора Дебая-Валлера  $\exp(-L_H(z))$ . По оси  $x$  глубина отсчитывается от границы раздела маска/подложка. Максимум деформации приходится на приповерхностный слой Si и затем практически монотонно спадает. Положительный знак деформации

свидетельствует о преимущественном растворении атомов междоузельного типа. По отрицательной деформацией непосредственно в области самой границы можно судить о небольшом пересыщении вакансиями вблизи неё. Большая часть вакансионных дефектов, по-видимому, осталась запертой в диэлектрических слоях структур, другая часть вакансий, рожденных в Si, могла стечь на поверхностный сток в виде межфазной границы. То есть в целом наблюдается всё та же картина пространственного отсечения I в Si фазе структур.

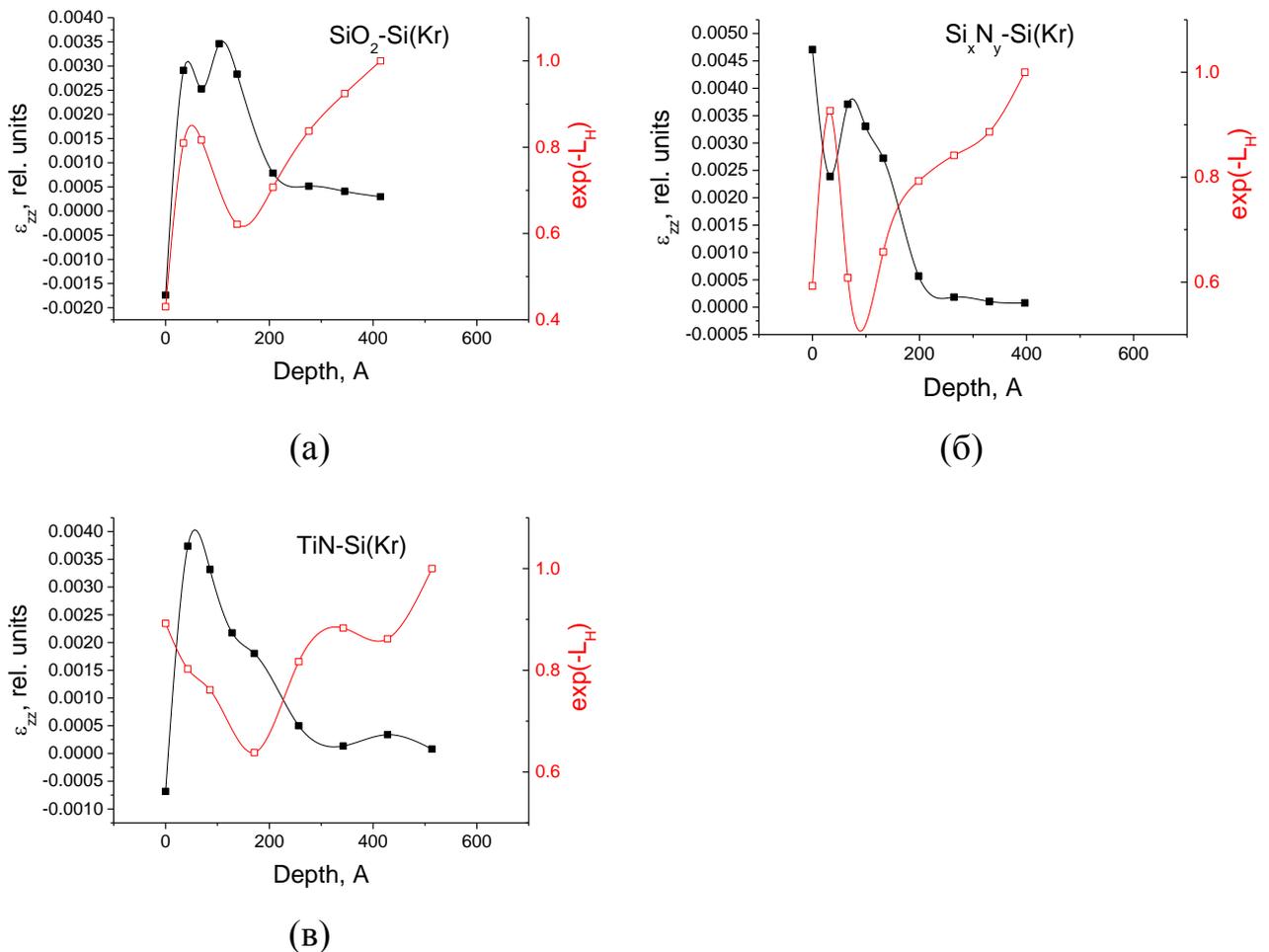


Рисунок 2.21. Профили распределения деформации  $\varepsilon_{zz}(z)$  (■) и показателя экспоненты статического фактора Дебая-Валлера  $L_H(z)$  (□) для структур SiO<sub>2</sub>-Si (а) Si<sub>x</sub>N<sub>y</sub>- Si (б) и TiN- Si (в), имплантированных ионами Kr<sup>+</sup>

По всему объёму ионно-имплантированной области фактор Дебая-Валлера отличен от 1, что свидетельствует о эффективном комплексообразовании в процессе облучения. При этом максимум концентрации комплексов, а

следовательно и максимальные пересыщения по  $I$ , во всех образцах локализованы на глубине 15-20 нм от межфазной границы, т.е. в области конца пробега имплантированных ионов. Среди классических представлений существует позиция, что ситуация формирования максимума дефектов I-типа в области конца пробега характерна для имплантации легких ионов, а при имплантации тяжелых ионов плотность  $I$  значительна во всем объеме разупорядоченной области. Экспериментальные данные противоречат этой концепции, говоря о том, что при имплантации тяжелых ионов в Si существует максимум распределения  $I$ , локализованный на глубине несколько глубже  $R_p$ .

На рис. 2.22 отдельно приведено сравнение профилей распределения структурных дефектов в ионно-имплантированных слоях Si структуры  $\text{SiO}_2$ -Si,  $\text{Si}_x\text{N}_y$ -Si и TiN-Si по глубине.

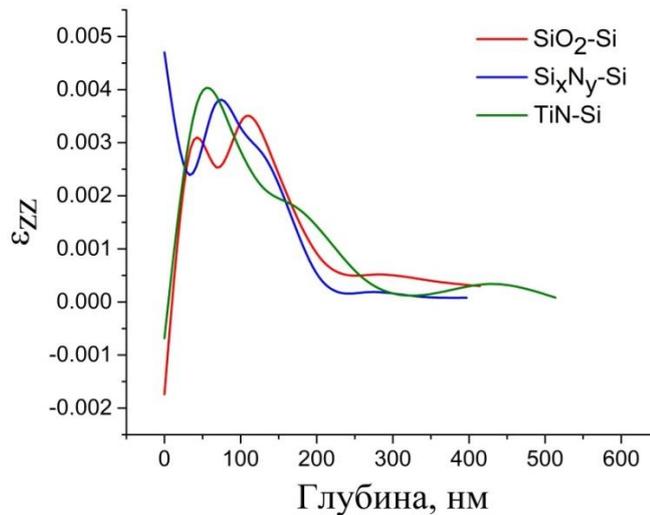


Рисунок 2.22. Профили распределения деформации по глубине ионно-имплантированных слоев структур  $\text{SiO}_2$ -Si,  $\text{Si}_x\text{N}_y$ -Si и TiN-Si

Распределение деформации в кремниевой решетке структур практически идентично, что свидетельствует о близком значении пересыщений решеток радиационными дефектами. Поскольку профиль деформации в Si, обусловленный введением радиационных дефектов, не зависит от метода нанесения пленок, материала пленки и значения механических напряжений на границе раздела фаз, то становится возможным распространить проявление эффекта устойчивого

разделения радиационных дефектов на всю группу структур «диэлектрик-Si», удовлетворяющих определенным ранее требованиям в части диффузионной прозрачности диэлектрических пленок для точечных дефектов.

#### 2.4. Выводы к главе 2

В главе развиты представления об особенностях формирования первичного фона радиационных дефектов в области границ раздела слоистых структур. В рамках разработанных модельных представлений такие 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 пробегов, для двухслойных структур в качестве критерия наблюдения эффекта предложено использовать равенство  $R_p$  толщине слоя, 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 примеров реализации таких ситуаций рассмотрено два типа структур микроэлектроники: КНИ структура с вакансионным пересыщением приборного слоя Si и структура типа диэлектрик – Si с пересыщением кремния по собственным междоузельным атомам. Теоретически обосновывается, что применение тяжелых ионов в задачах целенаправленного разделения профилей радиационных I и V приводит к стабильной картине разделения, слабо восприимчивой к качеству маски и свойствам межфазной границы гетероструктур.

Методами рентгеновской дифрактометрии на ряде частных примеров гетероструктур ( $\text{SiO}_2\text{-Si}$ ,  $\text{TiN-Si}$  и  $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$ ) подтвержден эффект устойчивого интегрального сепарирования радиационных вакансий и междоузлий при имплантации в них тяжелых ионов, проявляющийся в многократном пересыщении слоев Si по междоузлиям при том, что большая часть вакансий оставалась в слоях  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiN}$ ,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  и не могла проникнуть в Si и преобразоваться в кремниевые вакансии из-за различия структуры вакансий в фазе этих

диэлектрических пленок и в кристалле Si, а также из-за низкого коэффициента диффузии. Данные сведения, дополненные результатами обратного резерфордского рассеяния, проведенного на структурах SiO<sub>2</sub>-Si, свидетельствует о незначительной роли маски и межфазной границы в формировании первичного фона радиационных дефектов, что позволяет распространить действие эффекта устойчивого разделения на другие структуры класса «диэлектрик-Si», удовлетворяющие модельно определённым требованиям в части диффузионной прозрачности фаз для СТД.

Таким образом, в главе теоретически обоснован и экспериментально подтвержден новый подход к термически устойчивому интегральному разделению компонентов пар Френкеля, возникающих при ионной имплантации, приводящий к формированию нетипового фона радиационных дефектов, при котором становится возможным получить в области диффузии имплантированной примеси сильные пересыщения только по вакансиям или собственным атомам в междоузлиях. Кроме того, экспериментально подтверждены предполагаемые особенности распределения компонентов первичных радиационных пар Френкеля в окрестности межфазных границ слоистых структур, облученных ионами в модельно определенных условиях.

## **ГЛАВА III. ЭФФЕКТЫ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В УСЛОВИЯХ ПРОСТРАНСТВЕННО ДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ТД В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ**

В настоящей главе экспериментально подтверждены модельные представления диффузии примесных атомов на фоне пересыщения решетки кремния радиационными дефектами одного типа, выполнены оценки параметров пересыщенных растворов дефектов, степени усиления или подавления скорости диффузионных размытий ионно-имплантированных профилей легирующих примесей.

Ситуация устойчивого разделения радиационных I и V в гетерогенных структурах является нетипичной для радиационной физики и ранее не рассматривалась с позиций управления диффузией примесных атомов. А между тем, новый метод контроля над концентрацией неравновесных СТД в Si позволяет варьировать коэффициент диффузии примесных атомов в более широком диапазоне значений в сравнении с другими методами введения неравновесных СТД.

### **3.1. Модельные представления о диффузии примеси, имплантированной в структуру «диэлектрик – Si» в условиях пространственного сепарирования радиационных ТД**

Целенаправленное создание ситуации устойчивого интегрального разделения компонентов дальних пар Френкеля на границе раздела фаз структуры «диэлектрик – Si» будет способствовать пересыщению Si собственными дефектами преимущественно междоузельного типа. Причём пополнение твердого раствора СТД в Si во время отжига за счет той части первично сгенерированных дефектов, которые локализованы в диэлектрической маске, исключено ввиду крайне низкого коэффициента диффузии дефектов в данной фазе. Такая уникальная для радиационной физики ситуация будет задавать особые начальные условия для диффузионного перераспределения примеси в Si, заключающиеся в

формировании сильно разбалансированного по соотношению  $I$  к  $V$  фона неравновесных точечных дефектов.

Преобладание в кремниевой решетке неравновесных  $I$  будет способствовать повышению коэффициента диффузии по междоузельному каналу и его снижению по вакансионному. В этой связи вполне однозначно предсказывается характер диффузионного перераспределения примеси, диффундирующей преимущественно по средствам одного типа дефектов. Примером таких примесных атомов является  $Sb$  (диффузия по  $V$ ) и  $B, P$  (диффузия по  $I$ ). Следует отметить, что задачи сепарирования неравновесных дефектов и введения примеси в структуру «диэлектрик –  $Si$ », в принципе, могут быть решены независимо друг от друга. Но для простоты дальнейших рассуждений будем рассматривать ситуации их совместного решения путем имплантации примесных атомов с локализацией  $R_p$  в области границы раздела фаз гетероструктуры. А под диффузией понимать перераспределение примеси только в процессе отжига. В случае имплантации атомов  $Sb$  в  $Si$  через маскирующий слой диэлектрика коэффициент их диффузии в процессе отжига будет значительно ниже, чем при имплантации в голую поверхность  $Si$ . В случаях  $B$  и  $P$ , наоборот, будет наблюдаться ускорение диффузии. Изменение коэффициентов диффузии в рассмотренных ситуациях пропорционально концентрации неравновесных дефектов в соответствии с формулой (1.4).

Несколько иная ситуация будет наблюдаться в случае бинарного механизма диффузии примесных атомов. Пространственное разделение  $I$  и  $V$  на границе раздела фаз совсем не означает, что в решетке  $Si$  полностью отсутствуют вакансии. Их интегральная концентрация в  $Si$  может быть велика, просто не существенна по сравнению с концентрацией междоузельных атомов. Более того, соотношением концентраций радиационных компонентов пар Френкеля  $C_I/C_V$  в кремниевой решетке гетероструктур, в принципе, можно управлять за счет изменения энергии имплантации или толщины слоёв гетероструктуры или обоих этих параметров одновременно. И диффузия примеси в  $Si$  всё также будет осуществляться по бинарному механизму, только будет изменено соотношение

долей массопереноса примеси по вакансионному и междоузельному каналам. Отношение этих вкладов в Si решетке всегда определяется не только концентрацией неравновесных дефектов, но и соотношением вкладов диффузионных каналов:

$$\eta = \frac{f_v C_v}{f_l C_l} \quad (3.1)$$

где  $f_l$  и  $f_v$  – доли примесных атомов, диффундирующих соответственно по междоузельному и вакансионному механизму. В том случае, когда  $\eta$  больше 1 вклад вакансионного канала выше, и коэффициент диффузии примеси в решетке Si структуры «диэлектрик – Si», по крайней мере, будет не менее  $D_{\min} = D^0 f_v \frac{C_v}{C_v^0}$ .

Следует также принимать во внимание то, что в гетерогенных структурах существенное влияние на концентрацию подвижных точечных дефектов и, как следствие, диффузию примеси будут оказывать межфазные границы. Это влияние будет обусловлено стоком подвижных дефектов на межфазную границу во время распада радиационно-термических дефектов, что будет способствовать изменению состава дефектов в диффузионной зоне, а также проявлению эффекта сегрегации. В структурах класса «диэлектрик-Si» наиболее сильно подвержены стоку дефекты вакансионного типа ввиду термодинамического стимула и их пространственной близости к границе. Это будет способствовать увеличению отношения  $C_l/C_v$  и коррекции вкладов массопереноса примеси по вакансионному и междоузельному каналам в сторону увеличения последнего.

### **3.2. Диффузия атомов сурьмы и мышьяка, имплантированных в Si через пленку SiO<sub>2</sub>**

Одной из наиболее распространенных в Si микроэлектронике гетерогенных структур остается система SiO<sub>2</sub>-Si. Ввиду широкой изученности её свойств интерпретация результатов исследования диффузии примеси в данной структуре наиболее однозначна. Но это не отнимает общего характера эффектов диффузии в

слоистых гетерогенных структурах класса «диэлектрик - Si», наблюдаемых в частном случае системы SiO<sub>2</sub>-Si.

### 3.2.1. Исследование особенностей диффузионного перераспределения Sb

Как правило, сурьма не применяется в технологии изготовления передовых изделий Si микроэлектроники ввиду её низкой растворимости в кремнии. Однако, данный сорт примесных атомов крайне полезен в вопросах оценки актуальной концентрации и поведения дефектов вакансионного типа, поскольку диффузия сурьмы идёт преимущественно по данному каналу дефектов.

Методом вторичной ионной масс-спектропии исследованы особенности диффузионного перераспределения ионов Sb, имплантированных в структуру SiO<sub>2</sub>-Si. С целью анализа возможностей управления уровнем вакансионных пересыщений в кремниевой решетке гетероструктур исследовался целый набор структур, отличающихся между собой толщиной слоя SiO<sub>2</sub>. Диапазон изменения данного параметра определял положение среднего проецированного пробега ионов не только на границе раздела фаз, но также слева и справа от неё. Энергия имплантации ионов Sb составляла 65кэВ, а толщина SiO<sub>2</sub> принимала значения 18, 31 и 41 нм. Толщина пленок контролировалась методом эллипсометрии. Следует уточнить, что при используемой энергетике ионов условие локализации R<sub>p</sub> на глубине залегания межфазной границы достигается при толщине пленки в 31нм, что расчётным путём определено в программной среде SRIM (рис.3.1). Доза имплантации лежит в доаморфизационной области и составляет 10<sup>13</sup> см<sup>-2</sup>, что исключает проявление во время отжига эффектов, обусловленных твердофазной рекристаллизацией. Параметры отжига (T=820°C, 15мин) определяют полный распад {113}-дефектов, являющихся по литературным данным основным типом РТД, формируемых при данных условиях эксперимента.



– I и массоперенос атомов Sb с преимущественным вакансионным механизмом диффузии оказывается сильно подавлен. Полученные значения также говорят о неравновесности условий протекания диффузии, и том, что коэффициент  $D_{Sb}$  имеет прямую, но не линейную зависимость от толщины слоя  $SiO_2$  гетероструктур (табл. 3.1). С увеличением толщины маски от 0 до 41 нм коэффициент диффузии Sb снизился в  $5 \cdot 10^3$  раза. В таблице приведено отношение эффективного коэффициента диффузии к равновесному с учетом того, что равновесный коэффициент диффузии при заданных условиях отжига составляет  $\sim 9 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2/\text{с}$  [63].

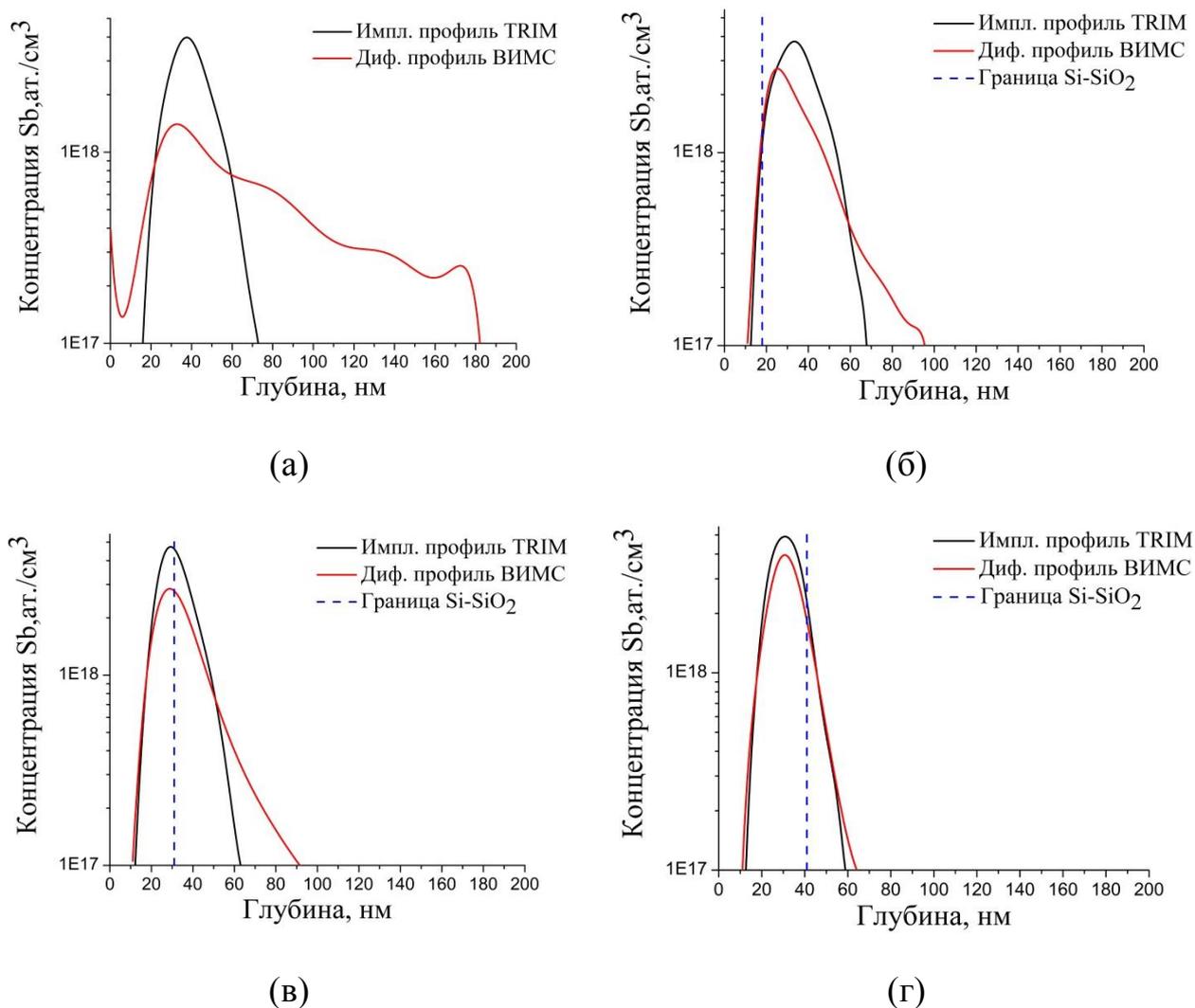


Рисунок 3.2. Сглаженные диффузионные профили распределения атомов Sb, имплантированных в монокристалл Si (а) и структуры  $SiO_2$ -Si при различной толщине маски: 18нм (б), 31нм (в) и 41нм (г)

В силу действия уравнения (1.4) и чисто вакансионного механизма диффузии сурьмы следует, что изменение коэффициента её диффузии в Si во время отжига исходно обусловлено только лишь изменением концентрации вакансий, и средний показатель вакансионных пересыщений пропорционален изменению коэффициента диффузии  $C_v/C_v^0 = D^*/D^0$ .

Таблица 3.1. Экспериментальные значения коэффициента диффузии Sb в кремниевой решетке структуры SiO<sub>2</sub>-Si в зависимости от толщины SiO<sub>2</sub>

Толщина SiO <sub>2</sub> , нм	Коэф. диф. Sb, см <sup>2</sup> /с	Изменение коэф. диф. D <sup>*</sup> /D <sup>0</sup>
0	5*10 <sup>-14</sup>	5.6*10 <sup>4</sup>
18	3*10 <sup>-15</sup>	3.3*10 <sup>3</sup>
31	2.5*10 <sup>-15</sup>	2.8*10 <sup>3</sup>
41	10 <sup>-17</sup>	1.1

То, что интегральная концентрация вакансий в кремниевой решетке структур SiO<sub>2</sub>-Si будет снижаться с увеличением толщины маскирующего слоя понятно уже из того, что снижается объём области генерации первичных дефектов в кристаллической фазе. Модельные профили первичных радиационных вакансий в исследуемых структурах на один внедренный ион приведены на рис. 3.3, где также для каждого профиля указано суммарное по глубине количество сгенерированных дефектов.

Рассчитанные значения интегрального количества вакансий для рассматриваемых ситуаций находятся в соотношении 1:4:11:22. Большая часть первично сгенерированных пар Френкеля (~80%) спонтанно аннигилирует. Если предположить, что интенсивность спонтанной аннигиляции пропорциональна произведению концентраций первичных I и V, то число запасенных дефектов вакансионного типа будет находиться ещё в меньшей пропорциональности. То есть отличие коэффициента диффузии Sb в структурах с маской SiO<sub>2</sub> по

отношению к монокристаллическому образцу должно быть менее чем в 22 раза. Стало быть, один лишь эффект снижения объема области дефектообразования за счет наличия маски не может объяснить экспериментально наблюдаемое изменение коэффициента диффузии, превышающее 4 порядка величины.

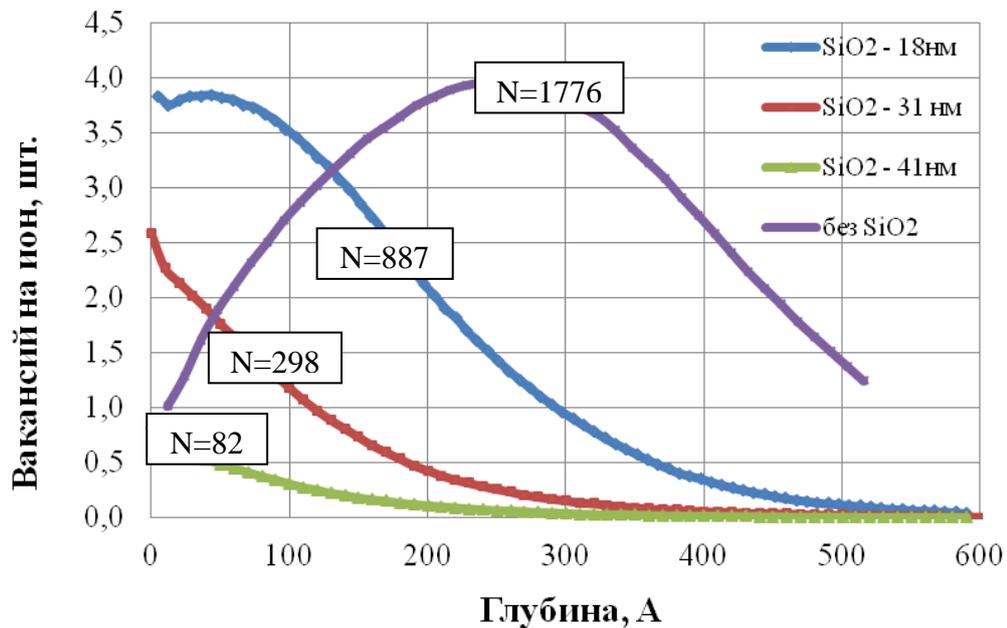


Рисунок 3.3. SRIM-профили генерации первичных вакансий в кремниевой решетке исследуемых структур SiO<sub>2</sub>-Si под действием облучения ионами Sb с энергией 65кэВ. Для каждого профиля указана интегральная концентрация радиационных вакансий.

Изменение состава первичных дефектов может быть обусловлено процессами рекомбинации и стока. Интенсивность рекомбинационных процессов повышается с увеличением концентраций I и V, поэтому более активно они должны проявляться в образце с отсутствием маски SiO<sub>2</sub>. Это приводило бы к более существенному снижению коэффициенту диффузии в нём, что противоречит экспериментальным данным. По-видимому, определяющий вклад в концентрацию подвижных вакансий вносит сток дефектов на межфазную границу. С уменьшением толщины маски с 31 до 18нм коэффициент диффузии Sb слабо меняется, не смотря на разницу в концентрации по запасенным вакансиям почти в 3 раза. По-видимому, это свидетельствует о насыщении значения

коэффициента диффузии, обусловленного высокой эффективностью стока вакансий на межфазную границу во время отжига. При более высоких толщинах маски значение коэффициента диффузии лимитируется интегральной концентрацией запасенных в решетке Si вакансий.

Для структуры SiO<sub>2</sub>-Si с толщиной маски 41 нм проводился анализ влияния межфазной границы на характер диффузии Sb. Для этого непосредственно после процесса ионной имплантации маска удалялась жидкостным методом. Удаление пленки SiO<sub>2</sub>, предшествующее отжигу, не привело к заметному изменению профиля примесных атомов (рис. 3.4).

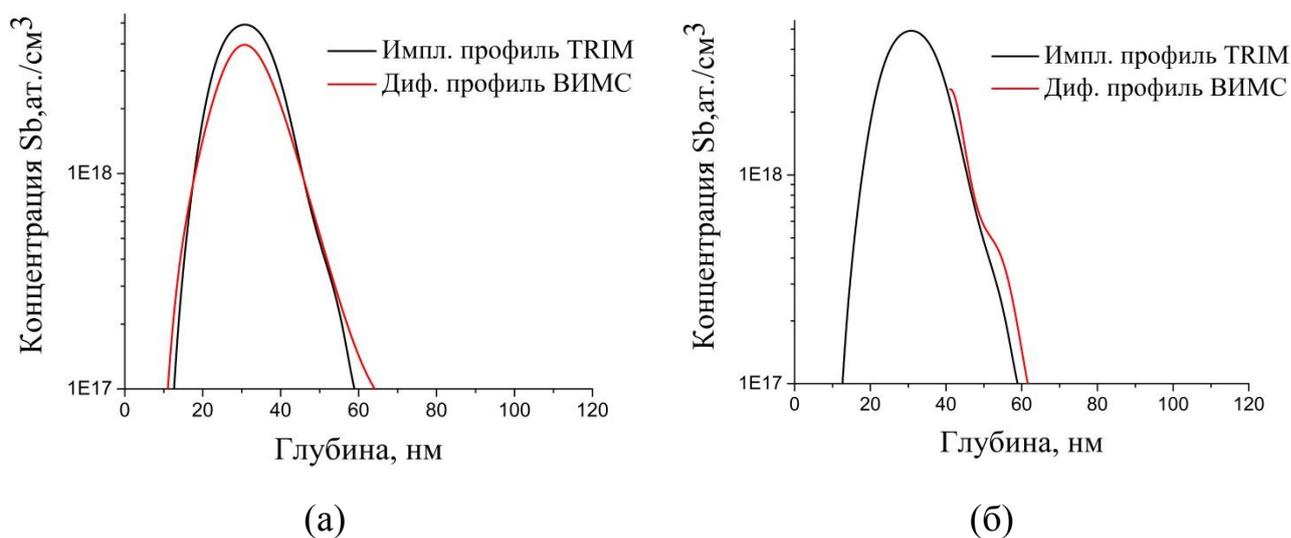


Рисунок 3.4. Сглаженные диффузионные профили распределения Sb в структуре SiO<sub>2</sub>-Si с толщиной маски 41 нм (а) и в структуре с постимплантационным удалением маски (б)

Это свидетельствует о слабом влиянии межфазной границы SiO<sub>2</sub>-Si на вторичные процессы дефектообразования. А также подтверждает предположение о том, что диффузионное размытие хвоста распределения примеси в данном случае лимитируется не граничными эффектами, а интегральной концентрацией растворенных в кремниевой решетке гетероструктуры вакансий.

### 3.2.2. Математическая модель диффузионного перераспределения As

Принимая во внимание эффект устойчивого интегрального разделения V и I в фазах гетерогенных структур, ряд хорошо известных эффектов диффузии примесных атомов может получить новую трактовку. Одним из таких эффектов является эффект восходящей диффузии As, имплантированного в структуру SiO<sub>2</sub>-Si. Суть его состоит в том, что диффузия As идёт против градиента концентрации примеси в направлении границы SiO<sub>2</sub>-Si. Известно несколько экспериментальных работ, в которых обнаружено накопление имплантированных атомов As в приповерхностных слоях кристаллов кремния после термического отжига. В [2, 64, 65] экспериментально исследовано диффузионное перераспределение As в структуре SiO<sub>2</sub>-Si в процессе низкотемпературного отжига (800-900<sup>0</sup>C). В [64] предполагается, что аккумуляция As в области границы раздела обусловлена диффузионным стоком собственных междоузельных атомов кремния (I) к границе раздела SiO<sub>2</sub>-Si. Авторы [65] считают, что эффект накопления As у границы раздела связан с твердофазной рекристаллизацией аморфизированного кремния, при которой движущийся из глубины к поверхности фронт рекристаллизации увлекает за собой атомы примеси к поверхности кристалла. При малых дозах имплантации предполагается [65], что граница SiO<sub>2</sub>/Si служит непосредственным стоком для атомов As. Такой же гипотезы придерживаются и авторы [2], где детально исследуется механизм сегрегации мышьяка вблизи границы. Однако позже в [64], было показано, что эффект накопления As вблизи поверхности наблюдали и с предварительно удаленным SiO<sub>2</sub>. В связи с этим, следует признать, что механизм перераспределения As в структуре SiO<sub>2</sub>-Si до сих пор остается неясным и требует дополнительного изучения.

Рассмотрим ситуацию ионной имплантации As в структуру SiO<sub>2</sub>-Si при условии  $R_p \approx h$ , где  $h$  толщина термической пленки SiO<sub>2</sub>. Из ранее приведенных рассуждений следует, что максимумы распределения V и I окажутся по разные стороны от границы раздела SiO<sub>2</sub>-Si, причем большинство вакансий в SiO<sub>2</sub>, а I в решетке Si (рис. 3.5а). Природа и подвижность V и I в SiO<sub>2</sub> и Si различна. Вакансии в SiO<sub>2</sub> относительно малоподвижны. Из квантово-механических

расчетов [66] энергии активации миграции  $V$  в  $\text{SiO}_2$  можно предположить, что их коэффициент диффузии при температуре  $850^\circ\text{C}$  лежит в пределах от  $1.5 \cdot 10^{-23}$  до  $6 \cdot 10^{-15}$   $\text{см}^2/\text{с}$  в зависимости от фазового состояния  $\text{SiO}_2$ . Это означает, что в процессе облучения и последующего отжига они не могут перейти в фазу  $\text{Si}$  и инвертироваться в  $V$  кремниевой решетки. Таким образом, в результате имплантации  $\text{As}^+$  через  $\text{SiO}_2$  при  $R_p \approx h$  можно ожидать, что благодаря «пространственному отсечению»  $V$  в слое  $\text{SiO}_2$ , решетка  $\text{Si}$  окажется пересыщена в основном  $I$ . Именно это положение будет определять начальные условия для формирования радиационно-термических дефектов и последующего диффузионного перераспределения  $\text{As}$  в структуре  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ .

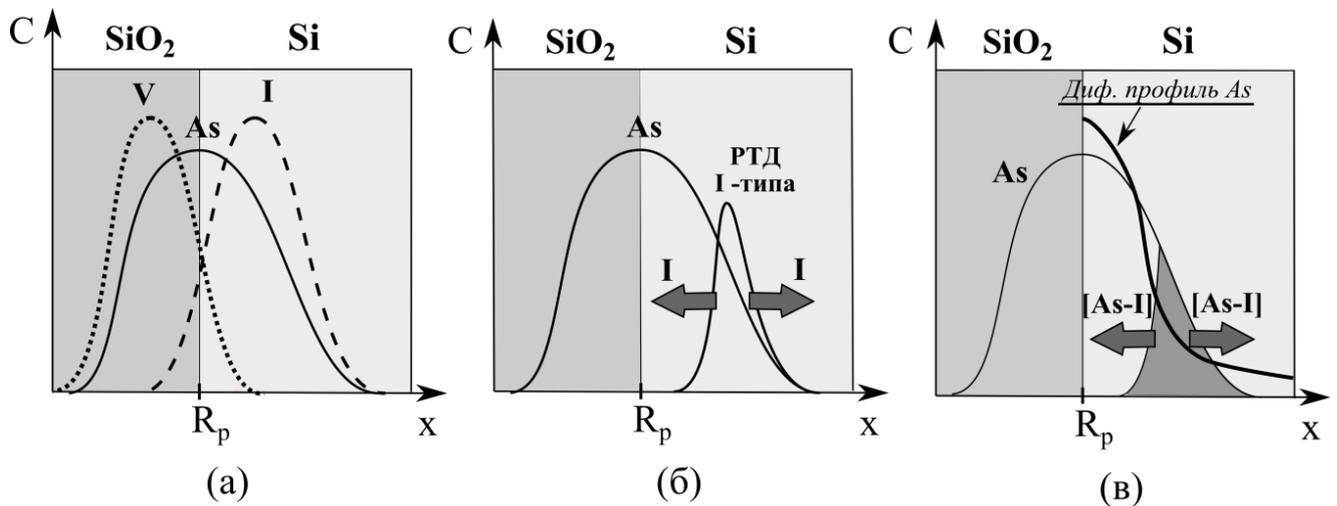


Рисунок 3.5. Модельные представления диффузионного перераспределения  $\text{As}$ : сепарирование  $V$  и  $I$  в фазах структуры  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  (а), формирование двух разнонаправленных потоков  $I$  в результате распада РТД (б), деформация профиля  $\text{As}$ , обусловленная диффузионными потоками пар  $[\text{As-I}]$  (в)

Механизм диффузии  $\text{As}$  в  $\text{Si}$  [38] носит комбинированный характер диффузии по вакансиям и с участием междоузлий. При этом доля  $\beta$  диффузии с участием междоузлий [38] достигает 40%, а отношение коэффициентов диффузии  $D^*/D^0$  мышьяка при неравновесных  $C_V$  и  $C_I$  и равновесных  $C_V^0$  и  $C_I^0$  концентрациях дефектов в  $\text{Si}$  задается выражением  $D^*/D^0 = \beta C_I/C_I^0 + (1-\beta) C_V/C_V^0$ . Величина отношений  $C_I/C_I^0$  и  $C_V/C_V^0$  при различных способах отклонения

подсистемы дефектов от равновесия может варьироваться в широких пределах [7, 67], но в случае достаточно тяжелого иона  $As^+$  даже при энергии в несколько кэВ с учетом макроскопического сепарирования должна составлять несколько порядков. Это означает, что на стадии постимплантационного отжига в фазе Si можно ожидать образование радиационно-термических объемных кластеров, дислокационных петель внедренного типа и одномерных кластеров в виде  $\{113\}$ -дефектов.

Далее будем считать, что максимум распределения радиационно-термических дефектов лежит в области максимума распределения I, т.е. на ниспадающей ветви распределения As (рис. 3.5б). Тогда, на более поздних стадиях постимплантационного отжига, при распаде этих 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 – в объем (рис. 3.5в). Наложение этой картины на изначально монотонно спадающий профиль As должен приводить к его деформации за счет увеличения концентрации As у поверхности и «на хвосте» распределения As, а также «провала» распределения в области максимума произведения концентраций As и радиационно-термических дефектов. Качественно аналогичная картина наблюдается в эксперименте [64]. Следует отметить, что в рамках предлагаемой модели обогащение поверхности Si атомами As будет происходить, вне зависимости от того, был или нет перед постимплантационным отжигом удален слой  $SiO_2$ .

Для численного моделирования деформации профиля распределения As в описываемой ситуации детализируем механизм его диффузии с участием I. Детали механизма диффузии мышьяка по средствам собственных междоузельных атомов Si до сих пор является предметом обсуждений. Собственные атомы Si могут стимулировать миграцию атомов As, вытесняя As из узлов решетки в междоузельное положение, или же образовывать с As подвижный комплекс As-I. В [68] из первых принципов на основе квантово-механических расчетов показано,

что диффузия мышьяка в составе пар As-I осуществляется с энергией активации 3.75 эВ, что находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Рассмотрим компоненты в подсистеме примесных атомов и собственных точечных дефектов на стадии распада радиационно-термических источников I. Подсистема примесных атомов включает в себя три компонента: атом As в узле решетки кремния (As), As в междоузельном положении ( $As_i$ ) и As в составе пары  $As_i$ -I (рис. 3.6).

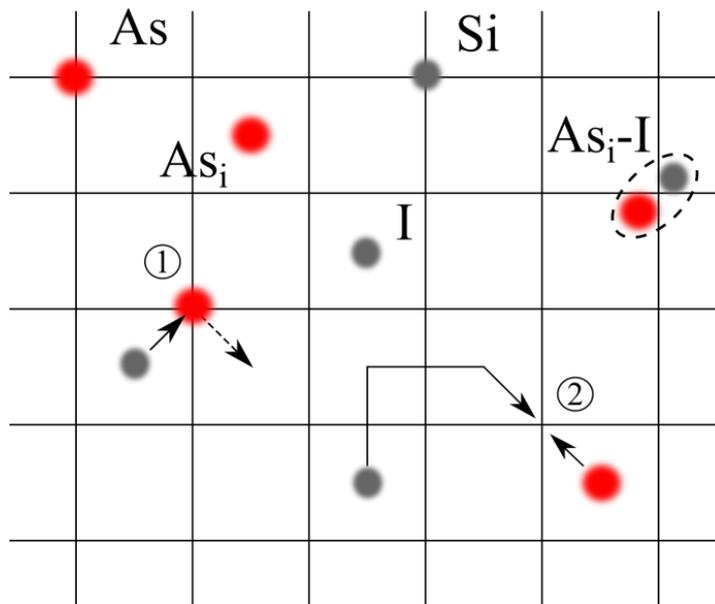


Рисунок 3.6. Квазихимические реакции, протекающие в подсистеме As: 1 – замещение по Воткинсу, 2 – образование высокоподвижной пары  $As_i$ -I

При этом изменения долевого содержания каждого компонента описываются двумя квазихимическими реакциями. Собственные междоузельные атомы I вытесняют As из узлов по механизму замещения Воткинса:  $[As] + [I] \rightarrow [As_i] + [Si]$ . Мышьяк в междоузельном положении  $As_i$  при взаимодействии с I образует высокоподвижную пару  $As_i$ -I:  $[As_i] + [I] \rightarrow [As_i - I]$ . Квазихимическая реакция с участием двух междоузельных атомов  $[As] + 2[I] \rightarrow [As_i - I] + [Si]$ , также приводящая к появлению пары  $As_i$ -I маловероятна как трехчастичная и далее во внимание не принимается. Далее будем считать, что доминирующий массоперенос определяется парой  $As_i$ -I.

С учетом сказанного, рассмотрим одномерную диффузионную задачу для пар  $As_i$ -I в полупространстве  $x \in [0; +\infty)$ :

$$\frac{\partial C_{As_i-I}}{\partial t} = D_{As_i-I} \frac{\partial^2 C_{As_i-I}}{\partial x^2} \quad (3.2)$$

где  $D_{As_i-I}$  – коэффициент диффузии пар, который в условиях пересыщенного раствора I может на несколько порядков превышать равновесное значение диффузии As.

Расчет проведем в следующих допущениях. Пренебрежем процессом диффузии имплантированной примеси в маске  $SiO_2$   $x \in [0; h]$ , где  $h$  — координата границы раздела  $SiO_2$  и Si. Будем считать, что вероятность образования пары  $As_i-I$  составляет 50% вне зависимости от концентрации составляющих компонентов, т.е. профиль распределения концентрации пары  $As_i-I$  в любой момент времени описывается функцией:

$$C_{As_i-I}(x, t) = \frac{1}{2} \min\{C_{As_i}(x, t); C_I(x, t)\} \quad (3.3)$$

Концентрация мышьяка в междоузельном положении  $As_i$  определяется вероятностью вытеснения As из узлового положения (замещение по механизму Воткинса):

$$\frac{\partial(C_{As_i} - C_{As_i-I})}{\partial t} = \sigma C_{As} C_I \quad (3.4)$$

где  $\sigma$  – сечение взаимодействия компонентов реакции. Указанный выше механизм вызывает и уменьшение узловой составляющей мышьяка:

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = -\sigma C_{As} C_I \quad (3.5)$$

Раствор собственных междоузельных атомов постоянно пополняется за счет распада радиационно-термических дефектов со скоростью  $G(x, T)$ , выражение для которой будет определено ниже. Кроме того, I достаточно высокоподвижны, а также способны замещать атомы мышьяка в узловом положении:

$$\frac{\partial(C_I - C_{As_i-I})}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2(C_I - C_{As_i-I})}{\partial x^2} - \sigma C_{As} C_I + G(x, T) \quad (3.6)$$

где  $D_I$  – коэффициент самодиффузии кремния.

Собрав выражения (3.2) и (3.4), а также (3.2) и (3.6) приходим к системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{As_i}}{\partial t} = D_{As_i-I} \frac{\partial^2 C_{As_i-I}}{\partial x^2} + \sigma C_{As} C_I \\ \frac{\partial C_{As}}{\partial t} = -\sigma C_{As} C_I \\ \frac{\partial C_I}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2 C_I}{\partial x^2} + (D_{As_i-I} - D_I) \frac{\partial^2 C_{As_i-I}}{\partial x^2} - \sigma C_{As} C_I + G(x, T) \end{cases} \quad (3.7)$$

Границу раздела  $SiO_2/Si$  считаем непроницаемой как для атомов примеси, так и для  $I$ , а их концентрации на бесконечности нулевыми, т.е.:  $\frac{\partial C_{As_i}}{\partial x} \Big|_{x=t_f} = 0$ ,

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial x} \Big|_{x=t_f} = 0, \quad \frac{\partial C_I}{\partial x} \Big|_{x=t_f} = 0, \quad C_{As_i} \Big|_{x=\infty} = 0, \quad C_{As} \Big|_{x=\infty} = 0, \quad C_I \Big|_{x=\infty} = 0.$$

Выражение для скорости генерации  $I$  в единице объема кристалла представим в виде произведения плотности распределения радиационно-термических дефектов  $U(x)$  на скорость их распада  $V(T)$ :

$$G(x, T) = U(x)V(T) \quad (3.8)$$

В соответствии с [69], скорость распада дефектов  $V(T)$  будет определяться:

$$V(T) = n_s S_{act} \nu_d \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (3.9)$$

где  $n_s$  – поверхностная плотность атомов на эмитирующей поверхности дефекта,  $S_{act}$  – площадь активной поверхности дефектов,  $\nu_d$  – дебаевская частота колебаний атомов решетки для  $Si$ , составляющая величину порядка  $2 \cdot 10^{13}$  Гц.

Энергия активации распада радиационно-термических дефектов  $E_a$  сильно зависит от типа дефектов. Так энергия распада  $\{113\}$  дефектов составляет порядка 3.7 эВ, а дислокационных петель  $\sim 4.5$  эВ [24].

Будем считать, что максимум профиля  $As$  лежит на расстоянии  $R_p$ , т.е. на границе раздела с окислом, а максимум распределения радиационно-термических

дефектов лежит на  $1.2R_p$  от поверхности  $\text{SiO}_2$ . Реально максимум их распределения является функцией температуры мишени при имплантации, массы, энергии и дозы ионов [70] и должен определяться для каждого случая отдельно.

Тогда распределения радиационно-термических дефектов имеет вид:

$$U(x) = m \exp\left(-\frac{(x-1.2R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right), \quad (3.10)$$

где  $\Delta R_p$  – дисперсия распределения, а  $m$  – параметр, физически характеризующий плотность распределения дефектов в объеме подложки. Таким образом, все слагаемые в (3.7) определены.

В основе численного метода решения положен метод конечных разностей. В соответствии с этим методом производные заменяются отношением бесконечно малых приращений – отношениями конечных разностей. Для этого необходимо на двумерное пространство  $(x, t)$  предварительно наложить сетку. Так, для временной производной произвольной функции  $C(x, t)$  получаем замену:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\tau}, \quad (3.11)$$

где верхние индексы соответствуют временной координате, а нижние – пространственной. Аналогично, производная функции по пространственной координате  $x$  имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{h}. \quad (3.12)$$

Вторая производная в соответствии с методом заменяется выражением:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C_{j-1}^i - C_j^i + C_{j+1}^i}{h^2}. \quad (3.13)$$

В результате система уравнений (3.7) сводится к следующей конечно-разностной схеме:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{C_{As_i j}^{i+1} - C_{As_i j}^i}{\tau} = D_{As_i-I} \frac{C_{As_i-I j-1}^i - C_{As_i-I j}^i + C_{As_i-I j+1}^i}{h^2} + \sigma C_{As_j}^i C_{I j}^i \\ \frac{C_{As_j}^{i+1} - C_{As_j}^i}{\tau} = -\sigma C_{As_j}^i C_{I j}^i \\ \frac{C_{I j}^{i+1} - C_{I j}^i}{\tau} = (D_{As_i-I} - D_I) \frac{C_{As_i-I j-1}^i - C_{As_i-I j}^i + C_{As_i-I j+1}^i}{h^2} + D_I \frac{C_{I j-1}^i - C_{I j}^i + C_{I j+1}^i}{h^2} - \\ -\sigma C_{As_j}^i C_{I j}^i \end{array} \right. \quad (3.14)$$

Совершая элементарные арифметические преобразования, система приводится к следующему виду:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{As_i j}^{i+1} = C_{As_i j}^i + \tau D_{As_i-I} \frac{C_{As_i-I j-1}^i - C_{As_i-I j}^i + C_{As_i-I j+1}^i}{h^2} + \tau \sigma C_{As_j}^i C_{I j}^i \\ C_{As_j}^{i+1} = C_{As_j}^i - \tau \sigma C_{As_j}^i C_{I j}^i \\ C_{I j}^{i+1} = C_{I j}^i + \tau (D_{As_i-I} - D_I) \frac{C_{As_i-I j-1}^i - C_{As_i-I j}^i + C_{As_i-I j+1}^i}{h^2} + \tau D_I \frac{C_{I j-1}^i - C_{I j}^i + C_{I j+1}^i}{h^2} - \\ - \tau \sigma C_{As_j}^i C_{I j}^i \end{array} \right. \quad (3.15)$$

Из-за того, что удалось разнести  $i$ -ый и  $(i+1)$ -ый моменты времени, система легко решается. То есть, зная значения искоемых функций для каждой пространственной координаты  $j$ , используя соотношения (3.15) получаем ту же пространственную сетку, только уже для момента времени  $(i+1)$ .

### 3.2.3. Сопоставление теоретического и экспериментального диффузионных профилей распределения As

Верификация модельных представлений проводилась путем численного расчета профиля распределения As на основе уравнений (3.7) с выше указанными граничными условиями в структуре SiO<sub>2</sub>/Si на стадии постимплантационного отжига в соответствии с параметрами эксперимента, поставленного в работе [64]. Расчет проведен для толщины  $h=20$  нм пленки SiO<sub>2</sub> и энергии ионов  $E=30$  кэВ, выбранной таким образом, что средний проецированный пробег находится вблизи интерфейса SiO<sub>2</sub>/Si. Доза имплантации принята  $5 \cdot 10^{15}$  см<sup>-2</sup>. При таких дозах после отжига экспериментально наблюдаются дислокационные петли и {113}-дефекты.

Температура отжига принята  $850^{\circ}\text{C}$ . Несмотря на то, что в эксперименте [2] время отжига составляло 4 час, в расчете оно было установлено существенно меньше и составляло 40 секунд, что по данным [25,71], совпадает со временем распада радиационно-термических дефектов.

На рис. 3.7 по данным вторичной ионной масс-спектропии [64] представлен исходный профиль распределения As после ионной имплантации (точки отмечены треугольниками) и профиль после отжига (точки отмечены квадратиками). На этом же рисунке приведены результаты численного расчета в соответствии с (3.15) с параметрами, определенными ниже.

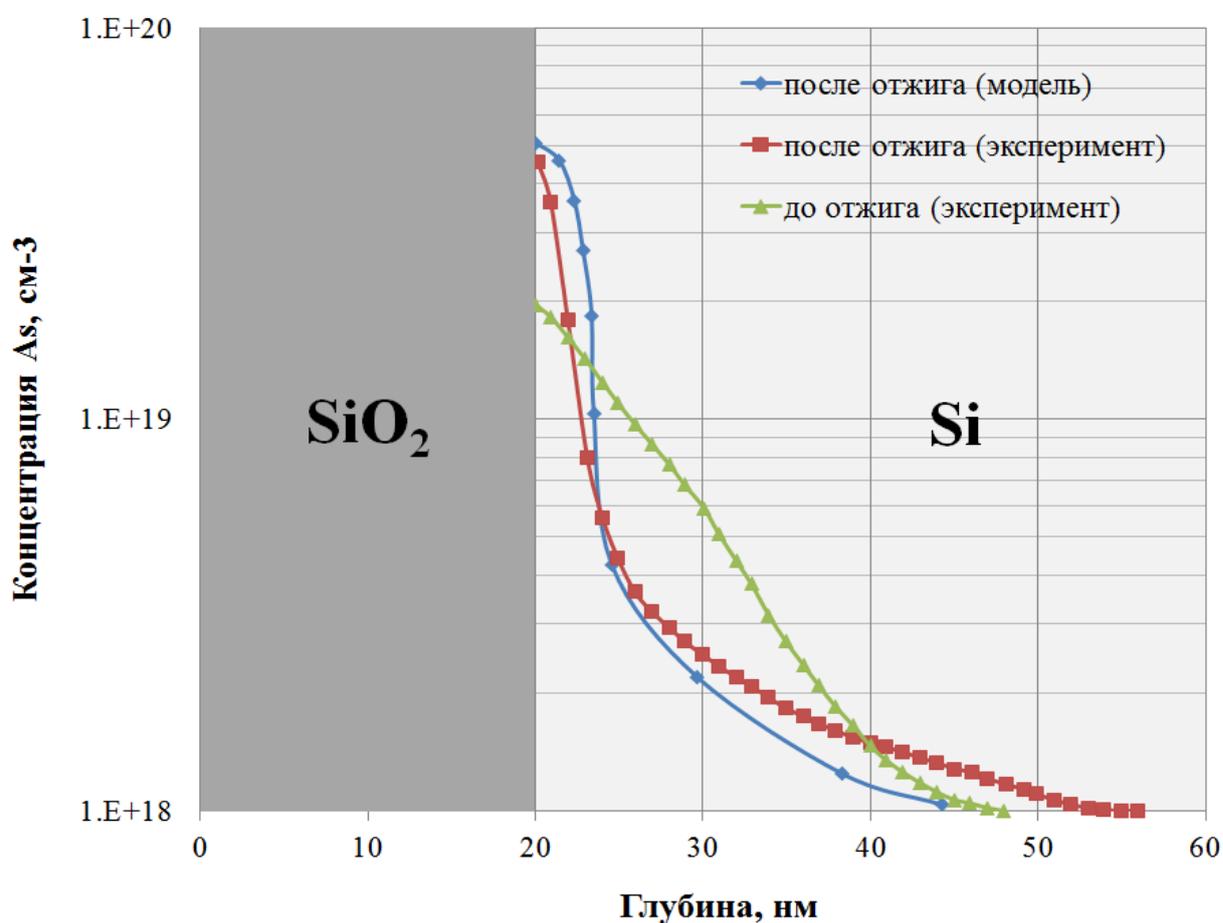


Рисунок 3.7. Экспериментальные профили распределения As после имплантации и отжига (по данным [64]), а также рассчитанный профиль распределения As после термического отжига

В результате эксперимента концентрация примеси вблизи границы SiO<sub>2</sub>/Si после диффузионного перераспределения выросла более чем в 3 раза. В области  $x > 40$  нм происходит размытие хвоста распределения As. Наряду с этим наблюдается провал концентрации ионно-имплантированного профиля в области  $1.5 R_p$ , где локализован максимум распределения пар As<sub>i</sub>-I. Из рис. 3.7 видно, что результаты расчета находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Эффективный коэффициент диффузии As по данным расчета составил  $3 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ , что существенно превосходит коэффициент диффузии в равновесных условиях ( $2 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ ). Полагая, что составляющая диффузии по вакансионному механизму пренебрежимо мала, отклонение реальной концентрации  $C_I$  от термодинамически равновесной  $C_I/C_I^0$  в приповерхностных слоях Si во время распада радиационно-термических дефектов составляла около  $1.5 \cdot 10^3$ . Другие параметры, которые были приняты для совпадения результатов вычислений с экспериментом, составили:  $\sigma - 10^{-11} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ ,  $S_{\text{act}} - 10^{-13} \text{ см}^2$ ,  $m - 7.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .

Следует отметить, что из величины  $S_{\text{act}} = 10^{-13} \text{ см}^2$  может быть получена оценка характерного размера дефектов усредненного на всем этапе эволюции дефектного фона во время отжига. В предположении, что основным типом радиационно-термических дефектов являются дислокационные петли, средний размер дефектов составит порядка  $d \sim 28 \text{ нм}$ . При этом среднее расстояние между дефектами составляет порядка  $\sqrt[3]{1/m} \sim 50 \text{ нм}$ .

### 3.3. Выводы к главе 3

В главе исследованы особенности диффузии примесных атомов на фоне пересыщения решетки кремния радиационными дефектами одного типа, что вызвано созданием условий устойчивого интегрального разделения первичных радиационных I и V.

Методом вторичной ионной масс-спектропии исследованы особенности диффузионного перераспределения ионов Sb, имплантированных в структуры

$\text{SiO}_2\text{-Si}$  с локализацией  $R_p$  на различной глубине в области интерфейса структуры. Обнаружено, что в сравнении с ионной имплантацией сурьмы в голую поверхность кремния имплантация через маску способствует значительному подавлению коэффициента диффузии Sb вплоть до термодинамически равновесного его значения. Обнаруженный эффект обсуждается с позиций устойчивого пространственного разделения первичных вакансий и собственных атомов в междоузлиях по разные стороны границы раздела  $\text{SiO}_2$  и Si, в результате чего кремний оказывается пересыщен преимущественно радиационными дефектами одного типа – I и массоперенос атомов Sb с преимущественным вакансионным механизмом диффузии оказывается сильно подавлен. 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 сложного диффузионного перераспределения атомов As, имплантированных в границу раздела структуры  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , впервые учитывающая особенности сформированного в таких условиях фона радиационных дефектов, приводящего к разнонаправленному массопереносу As в составе пар As-I и его накоплению вблизи поверхности за счет одного потока и затянутому вглубь образца «хвосту распределения» за счет другого потока. Описываемое поведение As полностью соответствует эксперименту, наблюдается даже в условиях удаления сразу после имплантации слоя  $\text{SiO}_2$  и, в отличие от моделей-аналогов не требует для описания экспериментальных фактов привлечения эффектов сегрегации примеси на границе раздела Si-SiO<sub>2</sub>.

Таким образом, экспериментально подтверждены современными аналитическими методами модельные представления диффузии примесных атомов на фоне пересыщения решетки кремния радиационными дефектами одного типа, выполнены оценки параметров пересыщенных растворов дефектов, степени усиления или подавления скорости диффузионных размытий ионно-имплантированных профилей легирующей примесей, в частности методами SIMS, впервые показано, что диффузия атомов Sb, имплантированных в Si в модельных режимах через маску SiO<sub>2</sub>, на стадии постимплантационного отжига может быть практически полностью подавлена, а диффузия атомов As имеет сложный характер и включает элемент «восходящей диффузии».

## **ГЛАВА IV. ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССОВ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ В ОКНА МАСОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ НАНОМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА**

Исследование физики процессов, сопровождающих ионное легирование, остается актуальным и сегодня. В первую очередь это обусловлено тем, что современные тенденции миниатюризации приборов электроники определяют необходимость формирования в полупроводниках легированных областей с размерами в нанометровом диапазоне [44].

С приближением проектных норм к квантово-размерному режиму активные области становятся не просто меньше, физика процессов их формирования носит принципиально иной характер [72]. В частности, близость поверхности и границ раздела фаз начинает оказывать существенное влияние и открывает новые возможности для инженерии дефектов [73]. При достижении определенных размеров процесс имплантации происходит в условиях сильных электрических и механических полей, порожденных маскирующим слоем, которые имеют уже не краевой характер, а их действие распространяется на всю область формирования малых ионно-легированных областей. Это означает, что в таких областях явления радиационной физики, электрическая активация и перераспределение примеси происходят в принципиально иных условиях.

Исследование физических особенностей формирования ионно-легированных областей с критически малыми планарными размерами позволит не только предсказать технологические трудности на пути постоянного стремления современной микроэлектроники к миниатюризации, но также найти пути их преодоления, механизмы управления геометрией и свойствами нанометровых легированных участков.

Глава посвящена теоретическим исследованиям эффектов управления ионно-имплантированным профилем примесных атомов при формировании мелких малых планарных 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, приводя к практически значимой коррекции её естественного диффузионного размытия.

#### 4.1. Эффекты диффузии в электрических полях, индуцированных накоплением заряда в маске

Известно, что точечные дефекты электрически активны и эффективно взаимодействуют с заряженными границами раздела и маскирующими слоями [74]. В процессе имплантации ионы тормозятся в диэлектрической маске и создают в ней радиационные дефекты. В [75] экспериментально показано, что, вне зависимости от типа используемых ионов, в маске  $\text{SiO}_2$  возникает долговременный электростатический заряд  $Q \approx 0,1\bar{e}\Phi$ , где  $\bar{e}$  – заряд электрона,  $\Phi$  – доза имплантации. В программной среде TCAD выполнены расчеты 2D распределения электрических полей в Si в области окна в маске, порождаемых встроенным зарядом в маске. Моделировался процесс ионной имплантации  $\text{As}^+$  с энергией 20 кэВ и дозой  $10^{16} \text{ см}^{-2}$  в топологическую структуру  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ . Толщина слоя  $\text{SiO}_2$  составляла 60 нм – в этом случае фоновая концентрация примеси под маской отличается от пиковой более чем на 4 порядка величины (рис. 4.1).

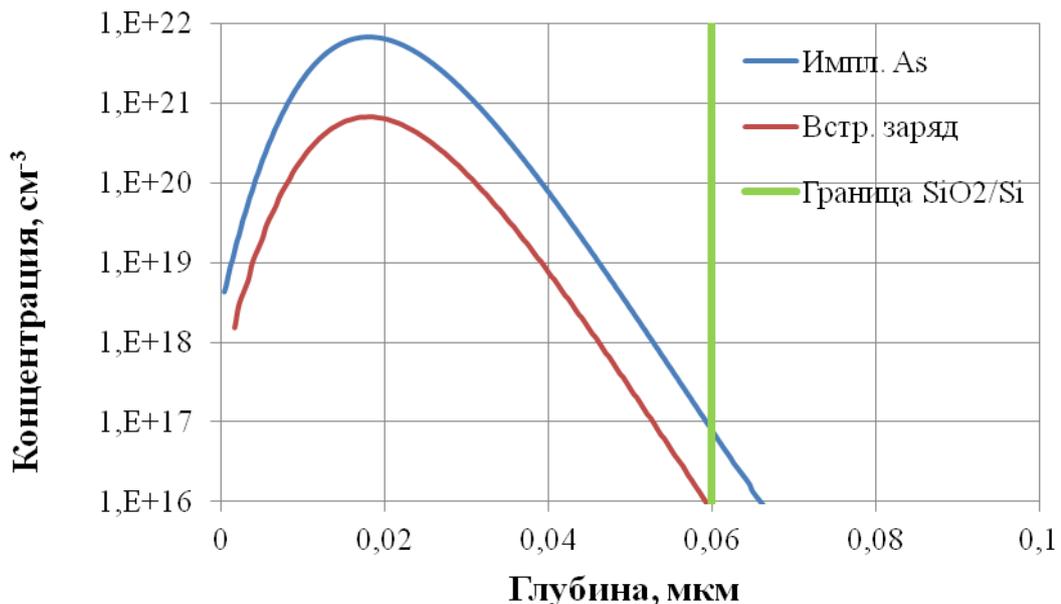


Рисунок 4.1. Профили распределения имплантированного As и активированной его части в структуре  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  с толщиной маски 60 нм

Природа радиационно-порожденных зарядов не является предметом обсуждений настоящей работы. Для простоты моделирования полагалось, что этот заряд обусловлен активацией примесных атомов в слое  $\text{SiO}_2$  с коэффициентом 10% от общей концентрации примеси.

Расчёты проводились для структур  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  со вскрытым окном в маске в диапазоне значений от 180 до 22нм. Характерный вид распределения электростатических полей в структуре в области окна, порождённых встроенным в маску зарядом, представлен на рис. 4.2.

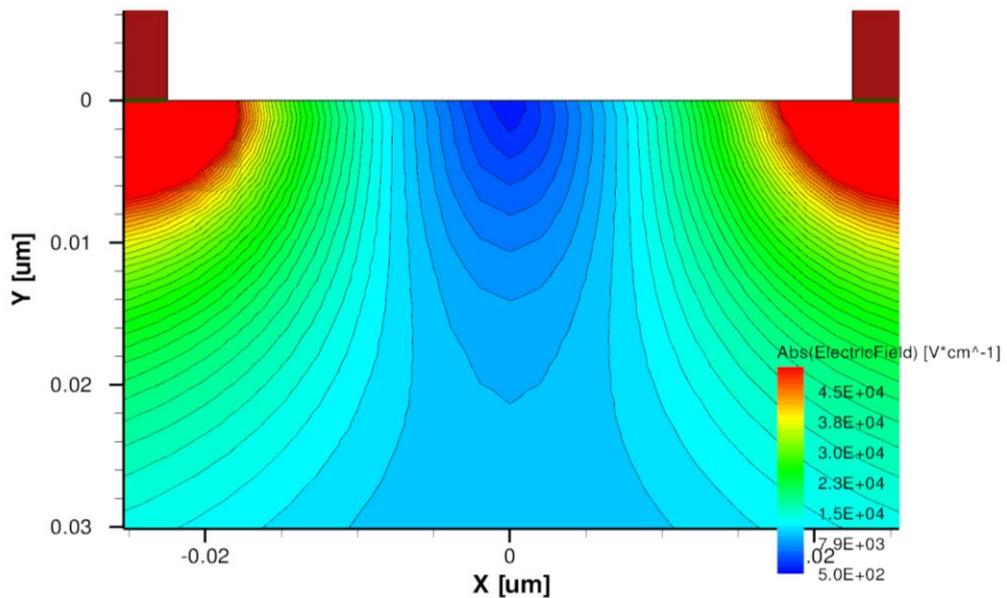
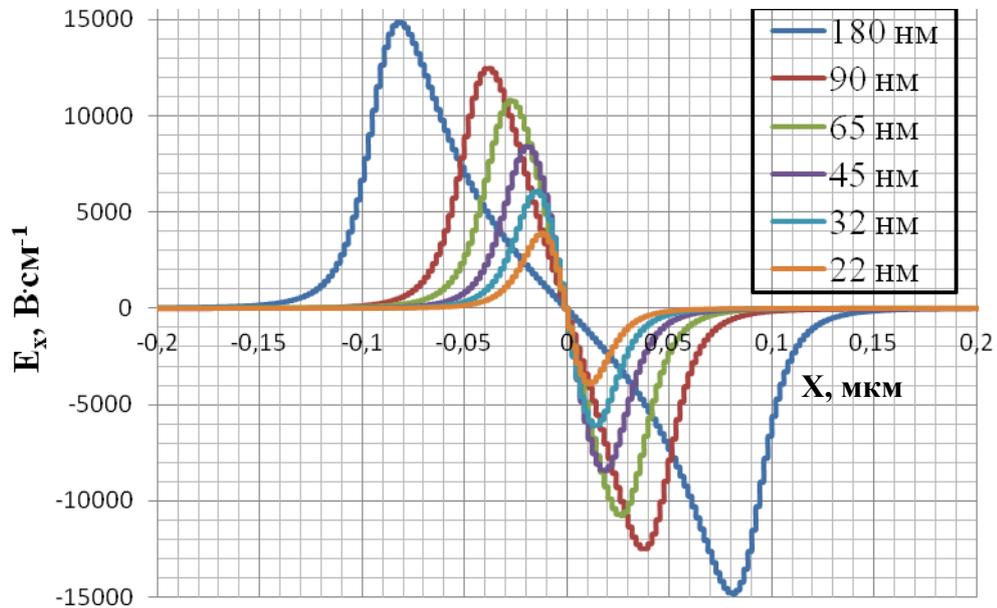


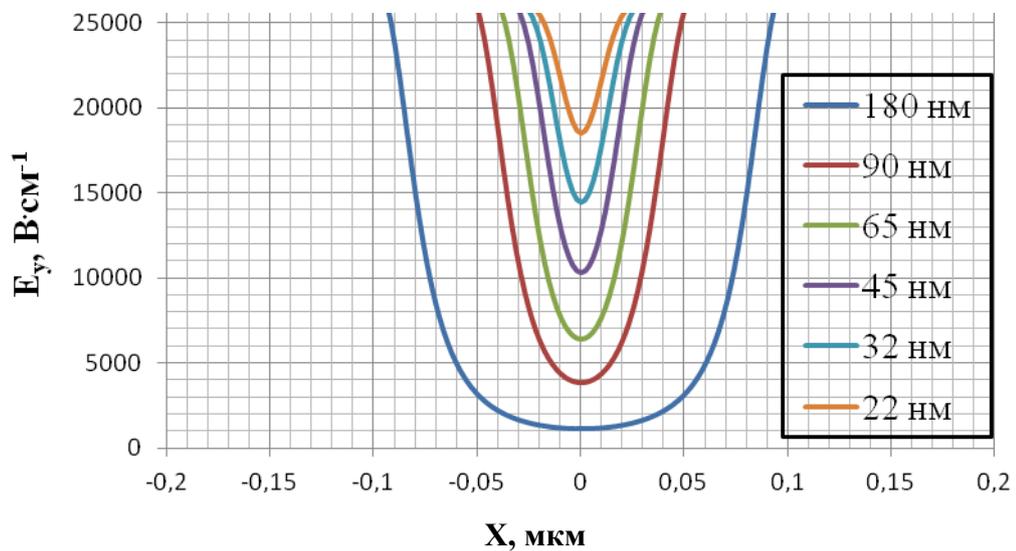
Рисунок 4.2. Двухмерная картина распределения электростатического поля в Si от заряженных центров в  $\text{SiO}_2$  маске, возникающих при ионной имплантации при ширине окна 45нм

В ходе моделирования получены распределения X- и Y- составляющих полей в планарном сечении, соответствующем среднему проецированному пробегу ионов в Si (рис. 4.3). Уменьшение ширины окна приводит к значительному возрастанию вертикальной составляющей поля во всей формируемой ионно-имплантированной области. Если при больших окнах наблюдался существенный провал значения  $E_y$  в центре области, то с понижением размера окна спад постепенно нивелируется. Подобно вертикальным составляющим поля, горизонтальные также имеют пиковые значения вблизи края

маски. Причём значение этого максимума снижается с уменьшением размера окна. Ввиду пространственной симметрии задачи в центре ионно-имплантированной области горизонтальная составляющая поля незначительна.



(a)



(б)

Рисунок 4.3. Распределение горизонтальной (а) и вертикальной (б) составляющей электрического поля в сечении среднего проецированного пробега ионов в области открытого окна в маске

В центрально-симметричном, нормальном к поверхности структуры сечении видно, что максимальное значение поля наблюдается в приповерхностной области (рис. 4.4). Причём с уменьшением размера окна значение пика повышается и его положение смещается в направлении к поверхности.

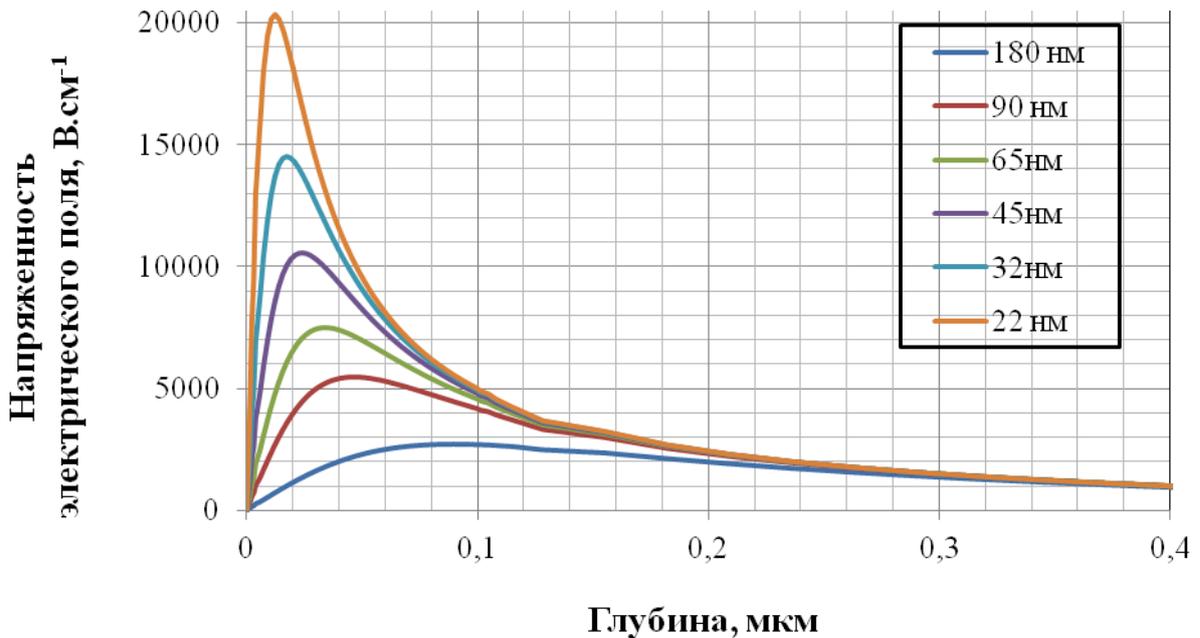


Рисунок 4.4. Распределение абсолютного значения напряженности электрического поля в нормальном, центрально симметричном сечении в области вскрытого окна в маске

Обобщая результаты проведенных расчётов, следует отметить, что сильное возрастание электростатических полей наблюдается непосредственно в области внедрения примесных атомов. С уменьшением ширины окна от 180 нм до 22 нм в различных точках формируемой ионно-имплантированной области изменение напряженности поля достигает 17 раз. Такое сильное изменение условий имплантации неизбежно должно отразиться на протекании различных радиационных процессов и, в итоге, на изменении профиля распределения внедренной примеси.

Поскольку точечные дефекты могут находиться в заряженном состоянии, то электрические поля будут приводить к их направленному дрейфу. Известно, что дефекты в Si обладают целым набором зарядовых состояний, характеризующихся

определенными энергетическими уровнями в запрещенной зоне (рис. 4.5). Переход дефекта из одной позиции решётки в другую может сопровождаться сменой зарядового состояния, но для простоты рассуждений будем пренебрегать этим эффектом. Для случая облучения малыми дозами, когда примеси замещения определяют положение уровня Ферми и состояние заряда дефекта, аналитически может быть определена концентрация заряженных дефектов каждого типа [76]:

$$[X^{+/-}] = [X_{tot}] \exp\left(-\frac{|E_{X^{+/-}} - E_F|}{kT}\right), \quad (4.1)$$

где  $[X^{+/-}]$  – концентрация дефектов в конкретном зарядовом состоянии,  $E_{X^{+/-}}$  – энергетический уровень, соответствующий ему, а  $[X_{tot}]$  – полная концентрация данного типа дефектов.

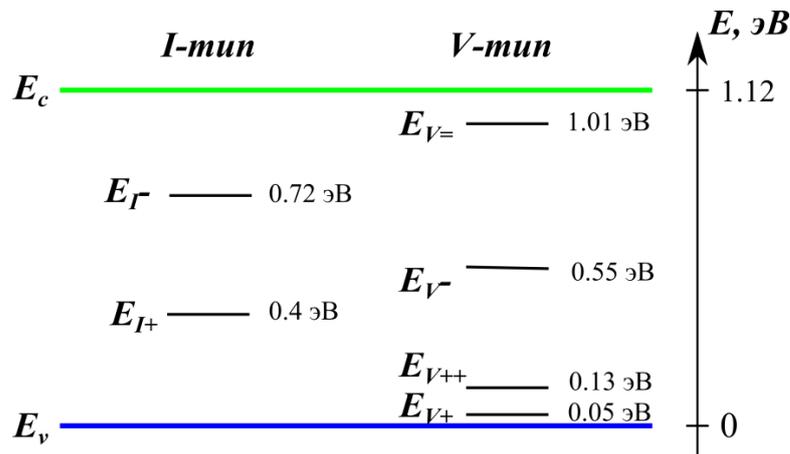


Рисунок 4.5. Схема положения энергетических уровней заряженных точечных дефектов в запрещенной зоне Si

Поскольку уровни расположены достаточно далеко друг от друга, то преобладание дефектов одного типа будет сопровождаться снижением концентраций других. Однозначно можно сказать то, что при имплантации в n-Si преимущественно будут наблюдаться отрицательно заряженные дефекты ( $V^-$ ,  $V^-$  и  $I^-$ ), а в p-Si – положительно заряженные ( $V^+$ ,  $V^{++}$  и  $I^+$ ). Однако их процентное содержание к общему числу структурных дефектов определяется начальным легированием подложки. Пользуясь положениями теории статистики носителей заряда в твердом теле легко определить спецификации исходного Si, для которых

уровень Ферми будет совпадать с уровнями дефектов. Практически важными случаями являются КДБ-0.002 (уровень  $E_{V^+}$ ), КДБ-0.05 (уровень  $E_{V^{++}}$ ) и КЭФ-0.01 (уровень  $E_{V^=}$ ). Остальные уровни дефектов находятся в области концентраций функциональной легирующей примеси на уровне менее  $10^{13} \text{ см}^{-3}$ , что ниже концентрации загрязняющих ростовых примесей. Поскольку прикладное значение имеют ситуации, касающиеся только дрейфовых потоков вакансионных дефектов, то рассматриваемые эффекты диффузии применимы для примесей, имеющих высокую долю вакансионного канала диффузии, например, Sb и As. Качественная картина коррекции границ ионно-имплантированной области, обусловленной дрейфовыми потоками дефектов, представлена на рис. 4.6. В случае p-Si дрейфовые поля способствуют созданию мелкозалегающей области с крутым глубинным профилем распределения примеси, а в случае p-Si способствуют формированию области с крутым профилем бокового распределения примеси.

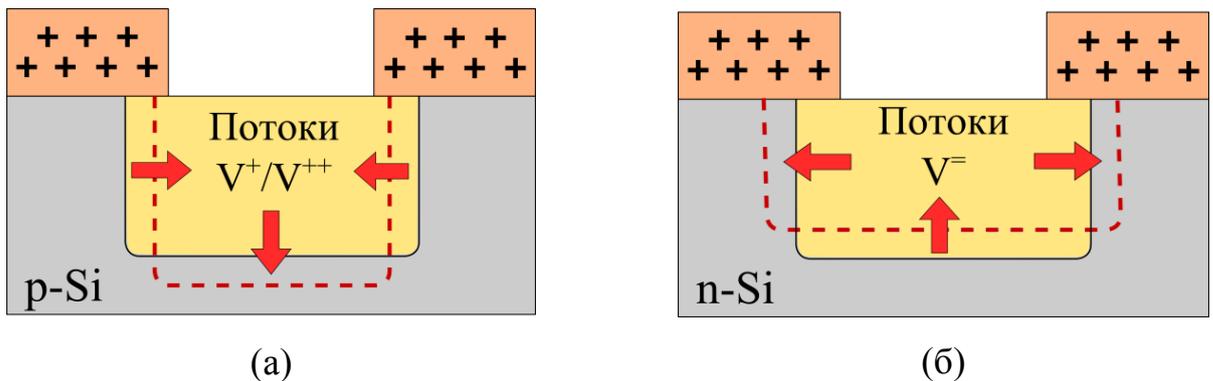


Рисунок 4.6. Схематическое изображение направлений потоков заряженных СТД и вызванное ими качественное изменение границ ионно-имплантированной области в p-Si (а) и n-Si (б)

Оценить глубину коррекции границ ионно-имплантированной области вследствие действия электрических полей маски можно путём расчета отношения дрейфового потока дефектов к диффузионному. Критерием значимого вклада дрейфового потока в коррекцию границ области принято достижение им 10% от величины диффузионного:

$$\frac{j_{др}}{j_{диф}} = \frac{DnE}{\frac{kT}{e} D \frac{dn}{dx}} = 10\% , \quad (4.2)$$

где  $n$  – концентрация дефектов в локализованной точке области, а  $D$  – коэффициент диффузии дефектов в процессе термализации (динамического отжига).

Полагая, что концентрация радиационных дефектов  $n(x)$  описывается законом Гаусса определено, что соотношение (4.2) будет выполняться при напряженности электрического поля 10 кВ/см. Сопоставляя данное значение расчётным профилям распределения напряженности поля в ионно-имплантированной области, установлены граничные значения размера окон, начиная с которых влияние электрических полей является существенным и его необходимо учитывать при формировании мелких локальных ионно-легированных областей. Коррекция глубины залегания ионно-имплантированной области 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.

#### **4.2. Эффекты диффузии в механических полях, обусловленных вскрытием окна в маске**

Процесс выращивания и осаждения тонких пленок на Si подложке сопровождается возникновением в подложке внутренних механических напряжений. В основном это обусловлено различием параметров решеток, модулей упругости, коэффициентов термического расширения и пластических свойств контактирующих материалов. Известно, что в полях градиентов механических напряжений наблюдается восходящая диффузия точечных дефектов (эффект Горского), заключающаяся в возникновении дрейфа вакансий из менее сжатой области кристалла в более сжатую [77]. Собственные

междоузельные атомы, напротив, стремятся переместиться в растянутую область кристалла, понижая свою концентрацию в области сжатия.

В ряде случаев роста покрытий на Si, например, термическое окисление Si, упругие напряжения обусловлены преимущественно дисбалансом коэффициентов термического расширения. В этой ситуации может быть получено аналитическое выражение для расчета значения напряжений в приповерхностном слое Si:

$$\sigma = \frac{E}{1-\nu} |\alpha_f - \alpha_s| \Delta T, \quad (4.3)$$

где  $E$  – модуль Юнга,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\frac{E}{1-\nu}$  – двусторонний модуль сжатия,  $\Delta T$  – разница между температурой процесса формирования пленки и комнатной,  $\alpha_s$  и  $\alpha_f$  – коэффициенты термического расширения материала подложки и пленки.

Для случая термического роста SiO<sub>2</sub>-Si рассчитанные согласно (4.3) значения напряжений в зависимости от температуры роста представлены в табл. 4.1, где также приведены экспериментальные значения данного параметра, полученные в [78] для сухого окисления Si.

Таблица 4.1. Сопоставление теоретических и экспериментальных значений механических напряжений, возникающих в гетероструктуре SiO<sub>2</sub>-Si, полученной в процессе термического окисления

Температура роста SiO <sub>2</sub> , °C	Расчётное значение $\sigma$ , МПа	Эксп. значение $\sigma$ , МПа ([78])
700	420	400
800	480	300
1000	640	160

В целом расчётные значения передают уровень реально возникающих напряжений в Si. Однако расчётная и экспериментальная зависимости напряжений от температуры прямо противоположны, что обусловлено

повышением вязкого течения  $\text{SiO}_2$  с повышением температуры и, как следствие, более эффективной релаксацией механических напряжений.

В условиях формирования однородного неразрывного слоя на поверхности подложки распределение механических напряжений в структуре носит линейный характер (рис. 4.7).

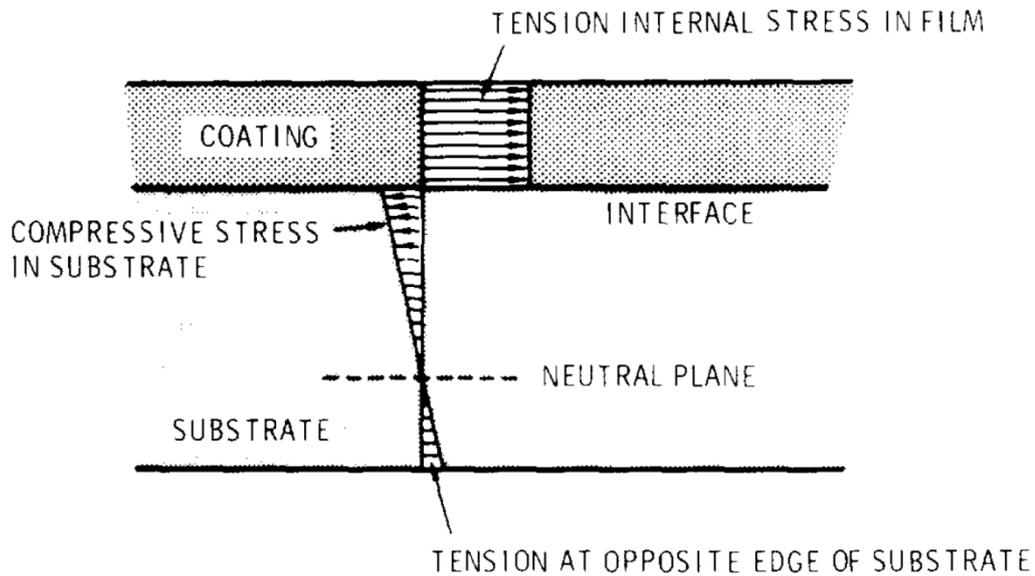


Рисунок 4.7. Схематичный вид распределения механических напряжений в системе пленка-подложка [79]

С математической точки зрения зависимость  $\sigma$  от глубины может быть представлена следующим образом:

$$\sigma(z) = \frac{\sigma_f E_f}{E_s} \left( 1 - \frac{z}{h_n} \right), \quad (4.4)$$

где  $\sigma_f$  - значение напряжений в пленке, а  $h_n$  - глубина залегания в подложке нейтральной (ненапряженной) плоскости.

Вскрытие в маскирующем слое окна вызовет всплеск механических напряжений на границах обрыва маски. Попытка получить аналитическое решение распределения упругих полей на краю вскрытого окна была предпринята Ху в [80]. Согласно его модели, распределение тангенциальных и нормальных составляющих упругих полей в подложке описываются следующими функциями:

$$\sigma_x = -\frac{2\sigma_f h_f}{\pi} \frac{x^3}{(x^2 + z^2)^2} \quad (4.5)$$

$$\sigma_z = -\frac{2\sigma_f h_f}{\pi} \frac{xz^2}{(x^2 + z^2)^2} \quad (4.6)$$

$$\tau_{zx} = -\frac{2\sigma_f h_f}{\pi} \frac{x^2 z}{(x^2 + z^2)^2}, \quad (4.7)$$

где  $\sigma_f$  - значение упругих напряжений в маске, а  $h_f$  - толщина маски.

Анализ представленных зависимостей показал, что на краю окна маски происходит пространственное разделение нормальных составляющих напряжений (рис. 4.8). Это означает, что в плоскости края маски будет происходить разделение дрейфовых потоков радиационных I и V, рожденных во время имплантации. Такая необычная ситуация ведет к довольно интересным последствиям. Поскольку диффузия примесных атомов ускоряется в направлении потока I и против потока V, то независимо от типа и механизма диффузии примеси характер распределения механических полей в области края маски всегда будет способствовать боковому диффузионному размытию профиля примесных атомов.

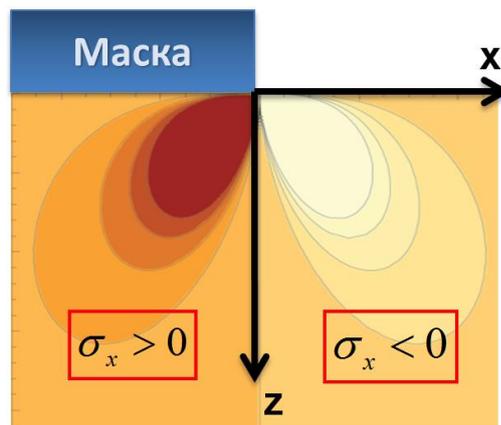


Рисунок 4.8. Распределение нормальной составляющей механических полей  $\sigma_x$  в области края обрыва маски

Дрейф точечных дефектов вызывает не сам показатель поля, а его градиент:

$$\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = -\frac{2\sigma_f h_f}{\pi} \frac{x^2(x^2 - 3z^2)}{(x^2 + z^2)^3} \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} = -\frac{2\sigma_f h_f}{\pi} \frac{2xz(z^2 - x^2)}{(x^2 + z^2)^3} \quad (4.9)$$

Величина потока собственных точечных дефектов, обусловленного градиентом механических напряжений может быть определена в соответствии с [81]:

$$j_{mex} = \frac{nD}{fkT} \omega \nabla \sigma, \quad (4.10)$$

где  $n$  и  $D$  – концентрация и коэффициент диффузии определенного типа STD,  $w$  – объем атома кремния,  $f$  – фактор корреляции, учитывающий возможность дефекта совершить обратный скачок (для Si равен 0,781). В том случае, когда его значение составляет существенную долю от диффузионного потока можно говорить о значимом вкладе упругих полей в коррекцию границ ионно-имплантированной области. По аналогии с электростатическими полями в качестве такого критерия принято значение 10% от величины диффузионного потока:

$$\frac{j_{mex}}{j_{диф}} = \frac{Dn}{D \frac{dn}{dx} fkT} \omega \nabla \sigma = 10\% . \quad (4.11)$$

При расчёте будем полагать, что маска испытывает напряжения сжатия значением 300МПа, а её толщина составляет 60нм. Анализировать будем область подложки в различных плоскостях на глубинах 0 – 50нм, полагая, что в этих границах будет вводиться функциональная примесь.

Расчет показал, что область распространения градиентов упругих полей в латеральном направлении является весьма протяженной и составляет от 2 до 3,5 мкм в зависимости от глубины рассматриваемой плоскости. 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  $j_{\text{мех}}/j_{\text{диф}}$  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.

#### 4.3. Эффекты распыления атомов маски и их контаминация в ионно-имплантированной области

Ионная имплантация всегда сопровождается распылением поверхности облучаемого твёрдого тела. При формировании активных областей распыляться будут не только атомы решетки кристалла, но и атомы маскирующего слоя, что и является предметом дальнейших обсуждений. Распыленные атомы маски будут вбиваться ионным пучком в область формирования активной области и привносить, таким образом, загрязнения, которые потенциально могут приводить к деградации электрофизических параметров области (рис. 4.9). Под деградацией параметров будем понимать превышение фоновой концентрации нефункциональных примесных атомов, хотя, безусловно, применим более широкий набор критериев, связанных с созданием электрически и химически-активных центров и полей различной природы. Несмотря на то, что данный эффект носит краевой характер – контаминация будет наблюдаться в области края вскрытого окна в маске, роль эффекта будет усиливаться с уменьшением планарного размера активной области.

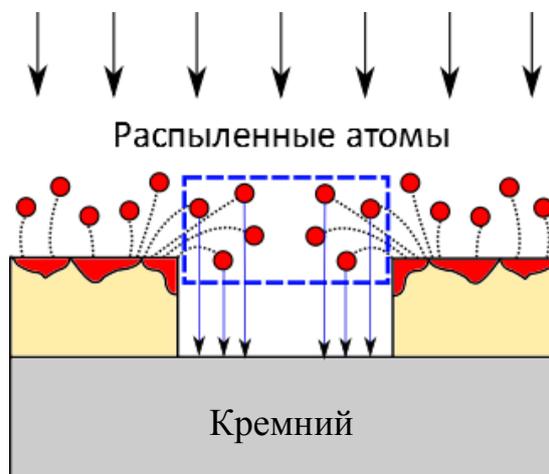


Рисунок 4.9. Схематическое изображение механизма контаминации формируемой ионно-имплантируемой области атомами маскирующего слоя

Эффективность распыления характеризуется коэффициентом катодного распыления  $Y$ . В работе [82] получено эмпирическое выражение для определения коэффициента распыления при нормальном падении пучка ионов:

$$Y(E) = 0.42 \frac{\alpha Q K S_n(\varepsilon)}{U_s [1 + 0.35 U_s S_e(\varepsilon)]} \left[ 1 - \left( \frac{E_{th}}{E} \right)^2 \right]^{2.8}, \quad (4.12)$$

где  $E$  – энергия имплантированных ионов;  $U_s$  – энергия сублимации атомов мишени;  $Q$  – варьируемый параметр;  $E_{th}$  – пороговая энергия распыления,  $\varepsilon$  – приведённая энергия,  $S_n(\varepsilon)$  и  $S_e(\varepsilon)$  – упругая и неупругая составляющие потери энергии внедряемого иона, коэффициенты  $\alpha$  и  $K$  – являются функциями энергии ионов, а также масс и атомных номеров внедряемых ионов и атомов мишени.

На рис. 4.10 представлены расчётные зависимости коэффициента распыления  $\text{SiO}_2$  от типа и энергии внедряемых ионов в соответствии с формулой 4.12. В области малых значений энергий коэффициент распыления тяжелыми ионами монотонно возрастает с повышением  $E$ , а для малых масс ионов – имеет максимум, соответствующий энергетике менее 10кэВ.

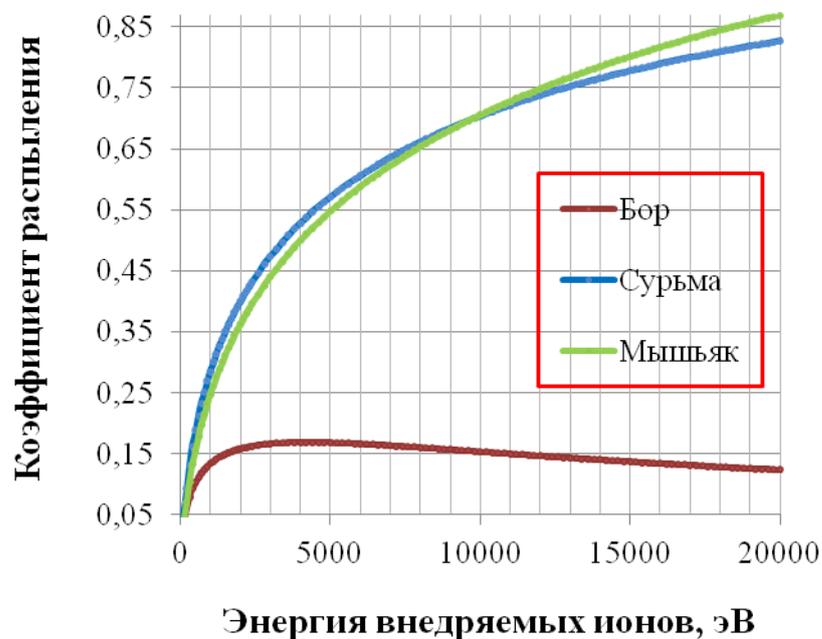


Рисунок 4.10. Кривая зависимости коэффициента распыления  $\text{SiO}_2$  от энергии облучаемых ионов в области малых значений энергии для случаев бора, сурьмы и мышьяка

Глубина распыления материала  $d$  определяется коэффициентом распыления:

$$d = \frac{Y(E)}{N} N_D, \quad (4.13)$$

где  $N_D$  – доза имплантированной примеси, а  $N$  – плотность атомов материала подложки.

Оценка максимальной дозы контаминации может быть выполнена в следующих допущениях. Малое значение размера окна маски позволяет считать облако распыленных над формируемой активной областью атомов однородным по составу и концентрацией равной в области над маской. Будем также полагать, что все распыленные над окном атомы испытывают упругое взаимодействие с первичным ионным пучком, приводящее к их внедрению в объем кристаллической решетки Si.

Коэффициент катодного распыления в соответствии с эмпирической формулой, полученной в [82] для нормального падения пучка ионов, составляет примерно 0,8. Это означает, что средняя глубина области распыления  $\text{SiO}_2$  достигает 0,5 нм, а плотность распыленных над окном и внедренных в кристалл атомов –  $1,14 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ . Следует заметить, что коэффициент распыления имеет сильную зависимость от угла падения ионов и будет иметь максимальное значение на естественно закругленных краях маски, что еще несколько повысит рассчитанное значение. Но даже без учета этого условия, оценка сверху для дозы контаминации составляет порядка 10% от дозы имплантации.

Довольно сложно предсказать, для каких размеров окон правомерны модельные допущения, но важно то, что роль контаминации атомов маски становится важным фактором при формировании локальных субмикронных ионно-имплантированных областей и выступает дополнительным ограничением, налагаемым на выбор материала маскирующего слоя.

#### 4.4. Выводы к главе 4

В главе теоретически исследованы эффекты управления ионно-имплантированным профилем примесных атомов при формировании

мелкозалегающих локальных ионно-легированных областей в Si под действием электрических и механических полей, связанных с присутствием маскирующего слоя.

Основываясь на литературных данных о величине встроенного электростатического заряда, возникающего в маскирующем слое 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 SiO<sub>2</sub>. Обнаружено, что максимальные значения электростатических полей наблюдается непосредственно в области целенаправленного введения примесных атомов, достигая значений  $\sim 10^3$ - $10^4$  В/см. Причём с уменьшением ширины окна от 180нм до 22нм 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. Установлено, что дрейфовый поток электрически активных дефектов может вносить существенный вклад в коррекцию границ ионно-имплантированной области, достигая 10% от величины диффузионного при размере окна 45нм - 65нм в различных направлениях формируемой области.

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. Дальность распространения градиента краевых упругих полей весьма высока, что определяет достижение величины дрейфового потока 10% от диффузионного в центре ионно-имплантированной области при ширине окна порядка 4-7мкм. Максимум градиента напряжений при этом наблюдается непосредственно вблизи края маски, где вклад дрейфового потока превышает 1000%. Отмечается, что выполненная оценка справедлива при сверхмалых дозах имплантации, поскольку

при продолжительном облучении должна быть сделана поправка на релаксацию источников напряжений за счет стока на них точечных дефектов.

Таким образом, 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.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

Основным результатом диссертационной работы является решение актуальной задачи, направленной на исследование новых подходов к контролируемому созданию радиационных, радиационно-термических дефектов и ионно-легированных областей в Si, имеющей существенное значение для разработки перспективных конструкций приборов Si микроэлектроники и оптоэлектроники.

В ходе диссертационной работы выполнены теоретические и экспериментальные исследования нового подхода к управлению распределением радиационных дефектов в гетероструктурах на основе Si и диффузионным профилем имплантированных примесных атомов в Si и получены следующие основные результаты:

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 SiO<sub>2</sub>-Si, TiN-Si и Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-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  $\text{SiO}_2\text{-Si}$ , 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  $\text{Si-SiO}_2$ .

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.

Результаты работы могут быть использованы при разработке методик получения мелких ионно-легированных областей в  $\text{Si}$ , а также положены в основу создания светоизлучающих центров в  $\text{Si}$  радиационно-термической природы.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СОКРАЩЕНИЙ

DLTS – нестационарная спектроскопия глубоких уровней;

LOCOS – метод формирования локальной изоляции транзисторов в технологии изготовления интегральных микросхем;

PECVD – усиленное плазмой химическое осаждение из газовой фазы;

RBS (POP) – спектроскопия резерфордского обратного рассеяния;

SIMS (ВИМС) – вторичная ионная масс-спектрометрия;

SRIM – пакет программ, предназначенных для моделирования физических процессов возникновения каскадов радиационных дефектов в веществе при облучении ионами;

TCAD – программная среда приборно-технологического проектирования;

I – собственные междоузельные атомы;

V – вакансии;

ДРПЛ – диффузное рассеяние рентгеновских лучей;

КДО – кривая дифракционного отражения;

КНИ – трёхслойная подложка со структурой кремний-диэлектрик-кремний;

РТД – радиационно-термические дефекты;

СТД – собственные точечные дефекты;

ТД – точечные дефекты;

ЭПР – электронный парамагнитный резонанс.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор считает нужным и важным выразить благодарность своему научному руководителю д-ру физ.-мат. наук Итальянцеву А.Г. за постановку интересных научных задач и плодотворные дискуссии, д-ру физ.-мат. наук Герасименко Н.Н. за ценные технические консультации и мудрые наставления, д-ру тех. наук Горневу Е.С. за мотивационные беседы, способствующие ускорению написания настоящей диссертационной работы, ЦКП МФТИ в лице Зайцева С.А. и ПАО «Микрон» в лице Ранчина С.О. за безвозмездное предоставление технологической базы для изготовления экспериментальных структур. Хочу также поблагодарить всех сотрудников отдела функциональной электроники и отдела 28 АО «НИИМЭ» за понимание важности настоящей работы и снисходительности в отношении к рабочей загруженности, в особенности Шульгу Ю.В. за поддержку и продвижение высоких стандартов качества выполнения работы.

**СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

1. Баранов, Г.В. Особенности перераспределения атомов As в Si при ионной имплантации структур SiO<sub>2</sub>-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 SiO<sub>2</sub>-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/SiO<sub>2</sub> / 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 SiO<sub>2</sub>/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 SiO<sub>2</sub>-Si structure / G.V. Baranov // Proceedings of the 26th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology". – Minsk, 2018. – P. 146.

**СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

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 SiO<sub>2</sub>/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/SiO<sub>2</sub> 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. Физические процессы в облученных полупроводниках / под ред.: Смирнова Л.С. – Новосибирск: Наука, 1977. – 256 с.
9. Риссел, Х. Ионная имплантация / Х. Риссел, И. Руге. – М.: Наука, 1983. – 359с.

10. Nastasi, M.A. Ion implantation and synthesis of materials / M. A. Nastasi, J. W. Mayer. – Berlin: Springer, 2006. – 263 p.
11. Федина, Л.И. Атомная структура протяжённых дефектов в имплантированных бором слоях кремния / Л. И. Федина, А. К. Гутаковский, А. В. Латышев // *Автометрия*. – 2014. – Т. 50. – №. 3. – С. 34-40.
12. Федина, Л.И. О рекомбинации и взаимодействии точечных дефектов с поверхностью при кластеризации точечных дефектов в Si / Л. И. Федина // *ФТП*. – 2001. – Т. 35. – №. 9. – С. 1120-1127.
13. Danilov, I. Spatial separation of vacancy and interstitial defects formed in Si by oxygen-ion irradiation at elevated temperature / I. Danilov, H. Boudinov, J. P. de Souza, Yu.N. Drozdov // *J. Appl. Phys.* – 2005. – V. 97. – N. 7. – P. 076106.
14. Holland, O.W. The role of defect excesses in damage formation in Si during ion implantation at elevated temperature / O. W. Holland, J. D. Budai, B. Nielsen // *Mater. Sci. Eng., A*. – 1998. – V. 253. – N. 1-2. – P. 240-248.
15. Углов, В.В. Радиационные эффекты в твердых телах: пособие для студентов / В. В. Углов. – Минск: БГУ, 2007. – 167 с.
16. Leveque, P. Vacancy and interstitial depth profiles in ion-implanted silicon / P. Leveque, H. Kortegaard Nielsen, P. Pellegrino, A. Hallen, B. G. Svensson, A. Yu. Kuznetsov, J. Wong-Leung, C. Jagadish, V. Privitera // *J. Appl. Phys.* – 2003. – V. 93. – N. 2. – P. 871-877.
17. Pellegrino, P. Separation of vacancy and interstitial depth profiles in ion-implanted silicon: Experimental observation / P. Pellegrino, P. Leveque, J. Wong-Leung, C. Jagadish, B. G. Svensson // *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – V. 78. – N. 22. – P. 3442-3444.
18. Abdelgader, N. High resolution electrical studies of vacancy-rich and interstitial-rich regions in ion-implanted silicon / N. Abdelgader, J. H. Evans-Freeman // *J. Appl. Phys.* – 2003. – V. 93. – N. 9. – P. 5118-5124.

19. Yarykin, N. Comment on "Separation of vacancy and interstitial depth profiles in ion-implanted silicon: Experimental observation" [Appl. Phys. Lett. 78, 3442(2001)] / N. Yarykin // Appl. Phys. Lett. – 2002. – V. 80. – N. 8. – P. 1492.
20. Щербачев, К.Д. О влиянии фотовозбуждения *in situ* на структуру нарушенного слоя в подложках Si (111), имплантированных ионами аргона / К.Д. Щербачев, В.Т. Бублик, А.В. Курипятник, В.Н. Мордкович, Д.М. Пажин // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2003. – №. 1. – С. 66-71.
21. Щербачев, К.Д. Особенности образования радиационных дефектов в слое кремния структур «кремний на изоляторе» / К.Д. Щербачев, В.Т. Бублик, В.Н. Мордкович, Д.М. Пажин // ФТП. – 2011. – Т. 45. – №. 6. – С. 754-758.
22. Смирнов, Л.С. О взаимодействии точечных дефектов с границей раздела SiO<sub>2</sub> – Si / Л.С. Смирнов, С.И. Романов // ФТП. – 1976. – Т. 10. – №. 5. – С. 876-881.
23. Феклистов, К.В. Преципитация бора в кремнии при имплантации и отжиге: расслоение на стадии Оствальдовского созревания: дис. канд. физ.-мат. наук: 01.04.10 / Феклистов Константин Викторович. – Новосибирск, 2011. – 211 с.
24. Claverie, A. Thermal evolution of extended defects in implanted Si: impact on dopant diffusion / A. Claverie, B. Colombeau, G. Ben Assayag, C. Bonafos, F. Cristiano, M. Omri, B. de Mauduit // Mat. Sci. Semicon. Proc. – 2000. – V. 3. – N. 4. – P. 269-277.
25. Stolk, P.A. Physical mechanisms of transient enhanced dopant diffusion in ion-implanted silicon / P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, D. J. Eaglesham, D. C. Jacobson, C. S. Rafferty, G. H. Gilmer, T. E. Haynes // J. Appl. Phys. – 1997. – V. 81. – N. 9. – P. 6031-6050.
26. Müller, D.C. Deactivation and activation of donors in silicon: PhD dissertation (Technical Sciences) / Dominic Christoph Müller. – Zurich, 2004. – 163 p.

27. Kalyanaraman, R. Enhanced low temperature electrical activation of B in Si / R. Kalyanaraman, V. C. Venezia, L. Pelaz, T. E. Haynes, H.-J. Gossmann, C. S. Rafferty // *Appl. Phys. Lett.* – 2003. – V. 82. – N. 2. – P. 215-217.
28. Clusters of interstitial atoms in Silicon and Germanium / A. Aseev, L. Fedina, D. Hoehl, H. Barsch. – Berlin: Academy Verlag, 1994. – 152p.
29. Vanhellefont, J. On the influence of interfaces and localized stress fields on irradiation-induced point-defect distributions in silicon / J. Vanhellefont, A. Romano-Rodriguez // *Appl. Phys. A.* – 1993. – T. 57. – №. 6. – C. 521-527.
30. Uedono, A. Depth profile of vacancy-type defects in B<sup>+</sup>-implanted Si with a SiO<sub>2</sub> overlayer by a variable-energy positron beam / A. Uedono, S. Tanigawa, J. Sugiura, M. Ogasawara // *Appl. Phys. Lett.* – 1988. – V. 53. – N. 1. – P. 25-27.
31. Pichler, P. Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon / P. Pichler. – New York: Springer-Verlag Wien, 2004. – 554p.
32. Libertino, S. Damage formation and evolution in ion-implanted crystalline Si / Libertino S., La Magna A. // *Materials science with ion beams.* – Berlin: Springer, 2009. – P. 147-212.
33. Guerrero, E. Determination of the retarded diffusion of antimony by SIMS measurements and numerical simulations / E. Guerrero, W. Jüngling, H. Pötzl, U. Gösele, L. Mader, M. Grasserbauer, G. Stingeder // *Journal of The Electrochemical Society.* – 1986. – V. 133. – N. 10. – P. 2181-2185.
34. Технология СБИС: В 2-х кн. Кн.1: Пер. с англ. / под ред.: С. М. Зи – М.: Мир, 1986. – 404с.
35. Elkin, E.L. Defects in irradiated silicon: electron paramagnetic resonance and electron-nuclear double resonance of the arsenic-and antimony-vacancy pairs / E.L. Elkin, G.D. Watkins // *Phys. Rev.* – 1968. – V. 174. – N. 3. – P. 881-897.
36. Ewwaraye, A.O. Electron-irradiation damage in antimony-doped silicon / A.O. Ewwaraye // *J. Appl. Phys.* – 1977. – V. 48. – N. 2. – P. 734-738.

37. Nelson, J.S. Valence and atomic size dependent exchange barriers in vacancy-mediated dopant diffusion / J.S. Nelson, P.A. Schultz, A.F. Wright // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – V. 73. – N. 2. – P. 247-249.
38. Cowern, N.E.B. General model for intrinsic dopant diffusion in silicon under nonequilibrium point-defect conditions / N.E.B. Cowern // *J. Appl. Phys.* – 1988. – V. 64. – N. 9. – P. 4484-4490
39. Xie, J. Diffusion and clustering in heavily arsenic-doped silicon: discrepancies and explanation / J. Xie, S.P. Chen // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V. 83. – N. 9. – P. 1795.
40. Harrison, S.A. Interaction between interstitials and arsenic-vacancy complexes in crystalline silicon / S.A. Harrison, T.F. Edgar, G.S. Hwang // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – V. 85. – N. 21. – P. 4935-4937.
41. Harrison, S A. Structure, stability, and diffusion of arsenic-silicon interstitial pairs / S.A. Harrison, T.F. Edgar, G.S. Hwang // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 87. – N. 23. – P. 231905.
42. Джадан, М. Влияние радиационных дефектов на диффузию мышьяка и сурьмы в имплантированном кремнии / М. Джадан, Оскар Хосе Араика Ривера, А.Р. Челядинский, В.Ю. Явид // Сборник трудов конференция «Материалы и структуры современной электроники». – Минск, 2010. – С.118-124.
43. Cowern, N.E.B. Mechanisms of implant damage annealing and transient enhanced diffusion in Si / N.E.B. Cowern, G.F.A. van de Walle, P.C. Zalm, and D.W.E. Vandenhoudt // *Appl. Phys. Lett.* – 1994. – V. 65. – N. 23. – P. 2981-2983.
44. Красников, Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП транзисторов (Изд. 2-е, исп.) / Г.Я. Красников. – М.: Техносфера, 2011. – 800с.
45. Челядинский, А.Р. Дефектно-примесная инженерия в имплантированном кремнии / А.Р. Челядинский, Ф.Ф. Комаров // *УФН.* – 2003. – Т. 173. – №8. – С. 813-846.

46. Баранов, Г.В. Особенности перераспределения атомов As в Si при ионной имплантации структур SiO<sub>2</sub>-Si / Г.В. Баранов, А.Г. Итальянцев, Ш.Г. Песков // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2017. – №. 2. – С. 4-10.
47. Tsukamoto, K. Evolution of ion implantation technology and its contribution to semiconductor industry / K. Tsukamoto, T. Kuroi, Y. Kawasaki // AIP Conference Proceedings. – 2011. – V. 1321. – N. 1. – P. 9-16.
48. Michael, I. New Topics in Ion Implantation / I. Michael // Ion Implantation Technology: Science and Technology. – IIT Press, 2016. – P. 1-34.
49. Jadan, M. Displacement of Boron from the Silicon Crystal Nodes. / M. Jadan, A.R. Chelyadinskii, V.Y. Yavid // American J. Applied Sci. – 2005. – V. 2 – N. 1. – P. 1-4.
50. Berezhnov, N.I. On the problem of Watkins substitution and migration of silicon atoms in silicon / N.I. Berezhnov, A.R. Chelyadinskii, M. Jadan and Yu.R. Suprun-Belevich // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. – 1993. – V. 73. – N. 3. – P. 357-361.
51. Челядинский, А.Р. Эффект Воткинса в полупроводниках. Явление и приложения в микроэлектронике. / А.Р. Челядинский, В.Б. Оджаев // Вестник БГУ. Сер. 1. – 2011. – № 3. – С. 10-17.
52. Sai-Halasz, G.A. Antimony and arsenic segregation at Si-SiO<sub>2</sub> interfaces / G. A. Sai-Halasz, K.T. Short, J.S. Williams // IEEE electron device letters. – 1985. – V. 6. – N. 6. – P. 285-287.
53. Griffin, P. B., Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice, and Modeling / P.B. Griffin, J.D. Plummer, M.D. Deal. – New York: Prentice Hall Electronics and VLSI Series, 2000. – 817p.
54. Ciurea, M.L. Defects in silicon: from bulk crystals to nanostructures / M.L. Ciurea, V. Iancu, S. Lazanu, A.-M. Lepadatu, E. Rusnac, I. Stavarache // Romanian Reports in Physics. – 2008. – V. 60. – N. 3. – P. 735-748.

55. Park, H. Effects of hydrostatic pressure on dopant diffusion in silicon / H. Park, K.S. Jones, J.A. Slinkman, M.E. Law // *J. Appl. Phys.* – 1995. – V. 78. – N. 6. – P. 3664-3670.
56. Bouville, M. The role of stress and diffusion in structure formation in semiconductors: PhD dissertation (Materials Science and Engineering) / Mathieu Bouville. – Michigan, 2004. – 142p.
57. Ozturk, M.C. Source/drain junctions and contacts for 45 nm CMOS and Beyond / M.C. Ozturk, J. Liu // *AIP Conference Proceedings.* – 2005. – V. 788. – N. 1. – P. 222-231.
58. Taur, Y. CMOS design near the limit of scaling / Y. Taur // *IBM J. Res. Dev.* – 2002. – V. 46. – N. 2.3. – P. 213-222.
59. Соболев, Н.А. Инженерия дефектов в имплантационной технологии кремниевых светоизлучающих структур с дислокационной люминесценцией (Обзор) / Н. А. Соболев // *ФТП.* – 2010. – Т. 44. – №. 1. – С. 3-25.
60. Щербачев, К.Д. Применение трехкристальной рентгеновской дифрактометрии для исследования ионоимплантированных слоев / К. Д. Щербачев, А. В. Курипятник, В. Т. Бублик // *Заводская лаборатория.* - 2003. - № 6. - С. 23-31.
61. 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.
62. Sangiovanni, D.G. Nitrogen vacancy, self-interstitial diffusion, and Frenkel-pair formation/dissociation in B1 TiN studied by ab initio and classical molecular dynamics with optimized potentials / D.G. Sangiovanni, B. Alling, P. Steneteg, L. Hultman, I.A. Abrikosov // *Phys. Rev. B.* – 2015. – V. 91. – N. 5. – P. 054301.
63. Fisher, D.J. Diffusion in Silicon 10 Years of Research / D.J. Fisher. – Switzerland: Scitec Publications, 2005. – 553 p.
64. 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 ЖЭТФ. – 2004. – Т. 30, №.21. – С. 21-26.
65. Koh, M. Quantitative evaluation of dopant loss in 5–10 keV As ion implantation for low-resistive, ultrashallow source/drain formation / M. Koh, K. Egusa, H. Furumoto, T. Shirakata, E. Seo, K. Shibahara, S. Yokoyama, M. Hirose // Jpn. J. Appl. Phys. – 1999. - V. 38. - P. 2324 -2328.
66. Yu, D. Multiscale Modeling of Formation and Structure of Oxide Embedded Silicon and Germanium Nanocrystals: PhD dissertation / Decai Yu. – Austin, 2005. – 140 p.
67. Итальянцев, А.Г. Генерация вакансий, стимулированная химическим травлением поверхности кристалла / А.Г. Итальянцев // Поверхность. – 1991. – №.10, С.122-127.
68. Harrison, S.A. Interstitial-mediated mechanisms of As and P diffusion in Si: Gradient-corrected density-functional calculations / S. A. Harrison, T. F. Edgar, G. S. Hwang // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74. – N. 19. – P. 195202
69. Итальянцев, А.Г. Трансформация размеров кластеров собственных точечных дефектов в полупроводниках / А.Г. Итальянцев, В.Н. Мордкович // ФТП. – 1983. – Т.17. – №.2. – С.217-222.
70. Курипятник, А.В. Особенности структуры ионоимплантированных слоев кремния, выявленные с помощью рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения: дис. канд. физ.-мат. наук: 01.04.10 / Курипятник Андрей Валериевич. - М., 2003. - 136 с.
71. RTA Simulation Using <311> Cluster Models [электронный ресурс] / SILVACO — Электрон. дан. — Режим доступа: [http://www.silvaco.com/content/kbase/rta\\_ws.pdf](http://www.silvaco.com/content/kbase/rta_ws.pdf), свободный. — Загл. с экрана (дата обращения: 24.05.2017).
72. Current, M.I. Ion implantation of advanced silicon devices: Past, present and future / M.I. Current // Mater. Sci. Semicond. Process. – 2017. – V. 62. – P. 13-22.

73. Seebauer, E.G. Trends in semiconductor defect engineering at the nanoscale / E.G. Seebauer, K.W. Noh // *Mater. Sci. Eng. R Rep.* – 2010. – V. 70. – N. 3–6. P. 151–168.
74. Gorai, P. Mechanism and kinetics of near-surface dopant pile-up during post-implant annealing / P. Gorai, Y.V. Kondratenko, E.G. Seebauer // *J. Appl. Phys.* – 2012. – V. 111. – N. 9. – P. 094510.
75. Mescheder, U. Properties of SiO<sub>2</sub> 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.
76. Seebauer, E.G. Charged point defects in semiconductors / E.G. Seebauer, M.C. Kratzer // *Mater. Sci. Eng. R Rep.* – 2006. – V. 55. – N. 3-6. – P. 57-149.
77. Тверскова, А.В. Влияние энергии образования вакансии и энергии миграции на потоки вакансий в полях градиентов напряжений / А.В. Тверскова, В.М. Кузнецов // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2009. – Т. 52. – №. 12-2. – С. 116-122.
78. Kobeda, E. SiO<sub>2</sub> film stress distribution during thermal oxidation of Si / E. Kobeda, E. A. Irene // *JVST B.* – 1988. – V. 6. – N. 2. – P. 574-578.
79. Thornton, J.A. Stress-related effects in thin films / J.A. Thornton, D.W. Hoffman // *Thin solid films.* – 1989. – V. 171. – N. 1. – P. 5-31.
80. Hu, S.M. Film-edge-induced stress in silicon substrates / S.M. Hu // *Appl. Phys. Lett.* – 1978. – V. 32. – N. 1. – P. 5-7.
81. Гегузин, Я.Е. Движение макроскопических включений в твердых телах / Я.Е. Гегузин, М.А. Кривоглаз. – М.: Металлургия. – 1971. – 344 с.
82. Egusa, K. Influence of high dose low energy ion implantation on dopant depth profile / K. Egusa, K. Shibahara // *Ion Implantation Technology Proceedings, 1998 International Conference on.* – IEEE, 1999. – V. 2. – P. 724-727.