

05;06;10;12

# О диффузии ионов мышьяка и самодиффузии в кремнии при имплантации

© К.Д. Демаков, В.А. Старостин, С.Г. Шемардов

Российский научный центр „Курчатовский институт“,  
123182 Москва, Россия  
e-mail: vastarostin@mail.ru

(Поступило в Редакцию 19 октября 2001 г. В окончательной редакции 5 апреля 2002 г.)

Приведены экспериментальные профили концентрации ионов мышьяка в кремнии при температурах подложки 20, 600, 1050°С и токе ионов 40  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ , а также при 1050°С и токе ионов 10  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ . По этим профилям и по данным других экспериментов проведено моделирование процесса радиационно-ускоренной диффузии ионов и самодиффузии кремния. Получен ряд интересных закономерностей, приведенных в выводах работы.

## Введение

Важное теоретическое и прикладное значение имеет исследование характера поведения различных примесных ионов, имплантируемых в полупроводниковые материалы, в зависимости от плотности тока, температуры среды, времени облучения, энергии иона и химических свойств взаимодействующих веществ. В данной работе нами исследовался процесс имплантации ионов мышьяка энергии 40 keV в кремниевую мишень в широком диапазоне температур.

## Эксперимент

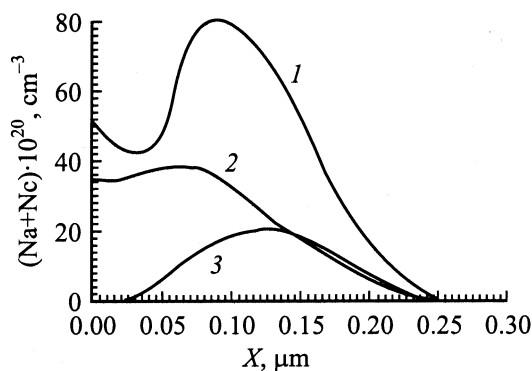
Опыты по облучению проводились на ионнолучевом ускорителе ИЛУ-3 [1]. Для нагрева мишени в процессе облучения был разработан специальный высокотемпературный приемник ионов. В качестве мишени был выбран монокристаллический кремний. Имплантация проводилась ионами мышьяка с энергией 40 keV, дозой  $2 \cdot 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup>. Распределение внедренных атомов по глубине исследовалось методом рентгено-структурного анализа с послойным травлением. Основные параметры облучения приведены в табл. 1. Измеренные профили концентрации приведены на рис. 1 и 2. Видно, что даже для облучения при комнатной температуре профиль содержит глубоко залегающий максимум.

**Таблица 1.** Основные экспериментальные параметры имплантации ионов мышьяка энергии 40 keV до дозы  $2 \cdot 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup>

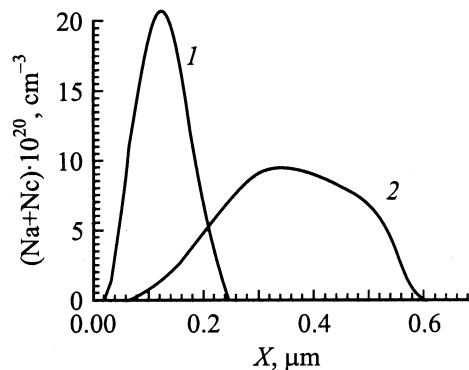
| № | T, °C | $j_0, \frac{\mu\text{A}}{\text{cm}^2}$ | $\mathcal{D}_{\text{exp}}, \frac{\text{ion}}{\text{cm}^2} \cdot 10^{16}$ | $V_b \text{ exp}, \frac{\text{cm}}{\text{s}} \cdot 10^{-10}$ | $t_{\text{max}}, \text{s}$ |
|---|-------|----------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|----------------------------|
| 1 | 1050  | 10                                     | 3.101                                                                    | 1.940                                                        | 3200                       |
| 2 | 1050  | 40                                     | 2.472                                                                    | 6.184                                                        | 800                        |
| 3 | 600   | 40                                     | 11.210                                                                   | 28.048                                                       | 800                        |
| 4 | 20    | 40                                     | 5.661                                                                    | 14.164                                                       | 800                        |

## Теоретическая модель

Для объяснения дрейфа примеси на глубину, сильно превышающую ее пробег при имплантации, была применена модифицированная в [2] модель В.В. Белошицкого для этого процесса [3]. Кроме диффузионного переноса, предполагается захват примеси вакансиями. Заметим, что чисто диффузионное уравнение при наличии источ-



**Рис. 1.** Экспериментальные профили концентрации мышьяка в кремнии при температурах 20 (1), 600 (2) и 1050°С (3) ( $40 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ ).



**Рис. 2.** Экспериментальные профили концентрации мышьяка в кремнии при токах 40 (1) и 10  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$  (2) (1050°С).

ника не дает решения с максимумом, расположенным дальше пробега ионов источника от границы. Важным моментом модели является ее неравновесность — диффузия происходит на фоне интенсивного рождения и аннигиляции дефектов. Эти процессы описываются следующей системой связанных уравнений:

$$\partial n_a / \partial t = D_a \partial^2 n_a / \partial x^2 - n_a n_v k_{\text{cap}} + n_c n_d k_{\text{act}} + j_0 \exp(-(R_p - x + x_0)^2 / 2\Delta R_p^2) / \sqrt{2\pi} \Delta R_p, \quad (1)$$

$$\partial n_c / \partial t = n_a n_v k_{\text{cap}} - n_c n_d k_{\text{act}}, \quad (2)$$

$$\partial n_d / \partial t = D_{dv} \partial^2 n_d / \partial x^2 - n_c n_d k_{\text{act}} - n_v n_d k_{\text{ann}} + j_0 N \sigma_d \Theta(R_p - x + x_0), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \partial n_v / \partial t &= D_{dv} \partial^2 n_v / \partial x^2 - n_a n_v k_{\text{cap}} - n_v n_d k_{\text{ann}} + j_0 N \sigma_d \Theta(R_p - x + x_0), \\ X_0 &= -v_b t, \quad N = 5.04 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}, \\ \sigma_d &= 3.52 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\Theta(x)$  — единичная ступенька;  $N$  — плотность ядер кремния;  $\sigma_d$  — ориентировочное сечение образования дефекта;  $R_p$  и  $\Delta R_p$  — пробег иона и его разброс;  $D_a$ ,  $D_{dv}$ ,  $k_{\text{cap}}$ ,  $k_{\text{act}}$ ,  $k_{\text{ann}}$  — свободные параметры модели с очевидным физическим смыслом коэффициентов диффузии примеси и пар дефект–вакансия и скоростей квазихимических реакций захвата примеси вакансиями, активации примеси междоузлиями и взаимной аннигиляции вакансий и междоузлий соответственно.

Условие на границе для примеси выбиралось нулевым исходя из эксперимента, что можно интерпретировать

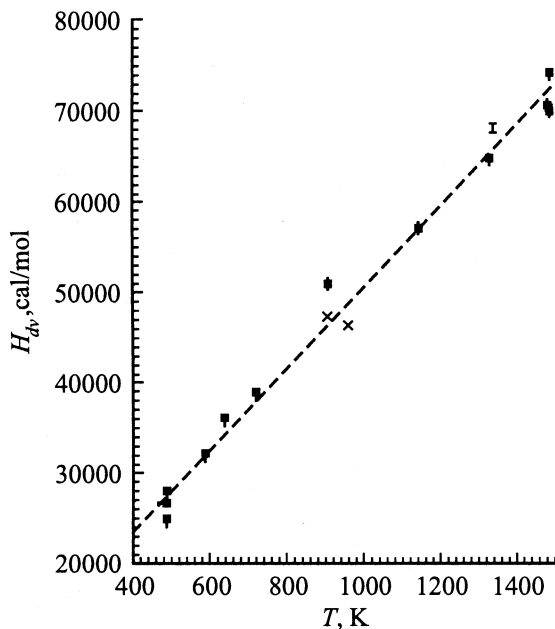


Рис. 3. Зависимость энтальпии миграции дефектов в кремнии от температуры по данным табл. 2 и 4.

Таблица 2. Рассчитанные диффузионные коэффициенты и энтальпии

| № | $D_a, \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \cdot 10^{-11}$ | $D_{dv}, \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \cdot 10^{-11}$ | $H_{dv}, \text{cal/mol}$ | $T_{\text{eff}}, ^\circ\text{K}$ |
|---|----------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|--------------------------|----------------------------------|
| 1 | 0.169                                              | 0.204                                                 | 64610                    | 1326                             |
| 2 | 0.540                                              | 0.0633                                                | 68151                    | 1335                             |
| 3 | 0.007                                              | 0.0463                                                | 47157                    | 913                              |
| 4 | 0.499                                              | 0.0127                                                | 31937                    | 589                              |

Таблица 3. Рассчитанные скорости квазихимических реакций

| № | $K_{\text{cap}}, \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \cdot 10^{-23}$ | $K_{\text{act}}, \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \cdot 10^{-23}$ | $K_{\text{ann}}, \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \cdot 10^{-23}$ |
|---|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| 1 | 2.355                                                         | 7.421                                                         | 2.609                                                         |
| 2 | 0.889                                                         | 8.321                                                         | 5.795                                                         |
| 3 | 0.943                                                         | 15.60                                                         | 5.763                                                         |
| 4 | 0.929                                                         | 8.260                                                         | 5.855                                                         |

Таблица 4. Рассчитанные энтальпии для других экспериментов

| Ion | $T, ^\circ\text{C}$ | $j_0, \frac{\mu\text{A}}{\text{cm}^2}$ | $E, \text{keV}$ | $T_{\text{eff}}, \text{K}$ | $H_{dv}, \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$ | Reference |
|-----|---------------------|----------------------------------------|-----------------|----------------------------|-----------------------------------------|-----------|
| Yb  | 20                  | 10                                     | 70              | 488                        | 27811*                                  | [5,6]     |
|     |                     |                                        |                 |                            | 26877                                   |           |
|     |                     |                                        |                 |                            | 24697                                   |           |
| Na  | 365                 | 0.3                                    | 7               | 638                        | 35845                                   | [7]       |
| As  | 20                  | 150                                    | 25              | 722                        | 38703                                   | [8]       |
| Tm  | 500                 | 30                                     | 150             | 906                        | 50900                                   | [9]       |
| C   | 20                  | 300                                    | 40              | 961                        | 46377*                                  | [2,10]    |
|     |                     |                                        |                 |                            | 46931                                   |           |
|     |                     |                                        |                 |                            | 47058                                   |           |
| As  | 850                 | 40                                     | 40              | 1143                       | 57164                                   | [12]      |
| Tl  | 1200                | 40                                     | 20              | 1478                       | 70591                                   | [3]       |
| As  | 1200                | 40                                     | 40              | 1482                       | 74154                                   | [11]      |
| Tl  | 1200                | 100                                    | 20              | 1484                       | 70064                                   | [4]       |

\* Для чистого кремния (и далее рост концентрации примеси).

как ее испарение с поверхности образца. Для междоузлий и вакансий использовалось такое условие, чтобы поток междоузлий вызывал смещение границы вещества со скоростью  $v_b$  (задача типа Стефана). Начальные условия и условия на противоположной границе брались нулевыми. Система уравнений (1)–(4) при вышеописанных начальных и граничных условиях решалась численно на ЭВМ методом конечных разностей. Значения свободных параметров модели подбирались методом наименьших квадратов так, чтобы наилучшим образом соответствовать экспериментальным профилям.

## Выводы

Результаты расчетов приведены в табл. 2 и 3. В табл. 2 показаны также энтальпии миграции дефектов (рассчитанные по закону Аррениуса) и эффективные температуры поверхностного слоя (с учетом нагрева пучком). В табл. 4 приведены данные некоторых других наших расчетов энтальпии самодиффузии кремния. На рис. 3 приведена зависимость энтальпии миграции дефектов от температуры по данным табл. 2 и 4.

Из рис. 2 видна сильная зависимость профиля от тока ионов мышьяка, противоположная нашим результатам по имплантации ионов таллия в кремний [3,4].

Из табл. 4 видны и дозовые зависимости энтальпии миграции дефектов для примесных ионов углерода и иттербия в кремнии, имеющие противоположный характер. Заметим, что иттербий мигрирует к поверхности, а углерод в глубь образца.

Авторы благодарны П.А. Александрову за постановку задач для экспериментальной и теоретической групп, О.Л. Головину за проведение измерений профиля концентрации, а также Барановой Е.К., Литвинову В.Л. и Бударягину В.В. за полезные замечания и обсуждение результатов.

## Список литературы

- [1] Гусев В.М., Бушаров Н.П., Нафтулин С.М., Проничев А.М. // ПТЭ. 1969. № 4. С. 19.
- [2] Старостин В.А. // ФиХОМ. 1999. № 5. С. 104–105.
- [3] Aleksandrov P.A., Baranova E.K., Beloshitsky V.V. et al. // Rad. Eff. 1986. Vol. 88. P. 249–255.
- [4] Демаков К.Д. Private communication.
- [5] Старостин В.А. Кинетика ионов иттербия, имплантируемых в кремний. Аннотация докл. XV Междунар. конф. „Взаимодействие ионов с поверхностью“. (ВИП-2001). Звенигород, 2001. Т. 2. С. 201.
- [6] Назыров Д.Э., Гончаров С.А., Суворов А.В. // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 8. С. 24–27.
- [7] McCaldin J.O., Widmer A.E. // Proc. IEEE. 1964. Vol. 52. N 3. P. 301–302.
- [8] Uesugi F., Kikuchi Y., Watanabe K., Hashimoto I. // Phys. Stat. Sol. (a). 2000. Vol. 177. N 2. P. 331–339.
- [9] Gibbons J.F., Moll J.L., Meyer N.I. // Nucl. Instrum. & Meth. 1965. Vol. 38. P. 165–168.
- [10] Александров П.А., Баранов Е.К., Демаков К.Д. и др. // ФТП. 1987. Т. 21. Вып. 5. С. 920–922.
- [11] Баранова Е.К. Private communication.
- [12] Демаков К.Д., Старостин В.А. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 4. С. 128–129.