

Сегрегация бора, имплантированного в кремний, на угловых конфигурациях границы окисления кремний/двуокись кремния

Г. А. Тарнавский, С. И. Шпак¹⁾, М. С. Обрект⁺¹⁾

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

⁺Siborg System Inc., University of Waterloo, N2L3G1 Ontario, Canada

Поступила в редакцию 23 марта 2001 г.

На основе компьютерного моделирования физико-химического процесса сегрегации легирующих примесей, имплантированных в базовый материал (кремний), изучаются особенности инъекции бора В на 4 типах угловых конфигурациях границы окисления “кремний/двуокись кремния” (прямой и обратный уступы, каверны типа “траншея” и “квадрат”), получены и проанализированы в главных чертах сложные картины распределения концентраций В в областях Si, SiO₂ и фронте SiO₂/Si.

PACS: 02.70.-c, 66.30.Jt, 68.10.Gw

Важной составной частью компьютерного моделирования сложной проблемы, связанной с разработкой материалов, обладающих необходимыми полупроводниковыми свойствами, является моделирование сегрегации – физико-химического процесса взаимодействия волны (границы) окисления базового материала с легирующими примесями различных химических материалов, имплантированных в этот базовый материал (подложку). Физический механизм сегрегации детерминирован возникновением на границе окисел/материал электромагнитного поля с узко локализованным и кратковременным потенциалом высокой интенсивности, выталкивающим (сегрегация типа эжекции) или втягивающим (сегрегация типа инъекции), в зависимости от конфигурации внешних электронных оболочек легирующих химических элементов. В настоящей работе исследуется сегрегация бора В-5 ($2s^2 2p^1$), имплантированного в кремний Si-14 ($3s^2 3p^2$). В скобках указаны конфигурации электронных оболочек элементов, структура которых определяет процесс сильной инъекции (втягивания) В на волне SiO₂/Si из материала Si в окисел SiO₂. Квантовомеханический подход к решению этой проблемы наталкивается на значительные трудности и практически не может быть реализован даже на современной вычислительной технике. Это приводит к необходимости создания приближенных моделей сегрегации. В представляемом цикле расчетов используется теоретическая модель и реализующий ее компьютерный алгоритм, подробно описанные в [1], где также указано место данной модели в ряду других использующихся моделей сегрегации. Вызываемая процессом термохимического окисления

кремния сегрегация легирующих примесей на границе SiO₂/Si характеризуется коэффициентом сегрегации $m = C_+/C_-$, где C_+ и C_- – концентрации примеси на границе материал/окисел со стороны материала и со стороны окисла, соответственно, термодинамические оценки которого дают значения с точностью до одного–двух порядков, прямые же экспериментальные измерения, проведенные разными авторами (см., например, [2–7]), показывают существенные различия в величине в зависимости от условий окисления. В приводимых ниже расчетах для В было принято значение $m = 0.3$, соответствующее наиболее общепринятому значению для термодинамически равновесной сегрегации (заметим, что неравновесность может существенно изменить m [8]). Вообще говоря, численное моделирование полупроводниковых свойств кремния с легирующими примесями в основном проводится при комплексном рассмотрении сразу нескольких процессов: имплантации примесей в базовый материал, его окисления, сегрегации примесей на границе волны окисления и диффузии примеси в окисле и материале. В простейших случаях результаты расчетов такой полной задачи коррелируют с экспериментальными данными с более или менее приемлемой точностью. В сложных задачах (в частности, с существенно криволинейными границами окисления) трактовка полученных результатов может быть весьма затруднительной, поскольку становится неясным, какой из перечисленных процессов моделируется с достаточной точностью, а какой – нет. Так, например, недостаточно качественный расчет процесса сегрегации, носящий осцилляторный характер, может быть завуалирован расчетом диффузии, обладающим высокими сглаживающими свойст-

¹⁾e-mail: shpak@itam.nsc.ru, obrecht@siborg.ca

вами. Это, на наш взгляд, делает совершенно необходимым раздельную отработку численного моделирования различных физических процессов для возможности адекватного сравнения с экспериментальными результатами типа [9, 10] на пути создания новых технологий получения полупроводниковых материалов.

Постановка задачи. Рассматривается процесс сегрегации химического элемента IIIа-подгруппы (бора), имплантированного в кремний, при движении в нем волн окисла. Границы SiO_2/Si имеют изломы образующей прямоугольной формы, составляющие 4 типа конфигурации окисла в материале: “прямой и обратный уступы” и каверны типа “траншея” и “квадрат” (см. рис.1а, 2а, 3а и 4а). Начальное распределение примесей в Si принято равномерным,

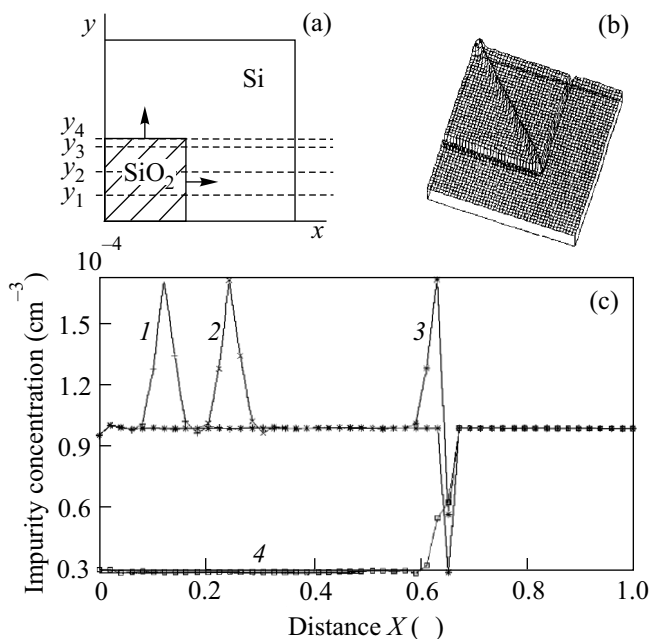


Рис.1. Сегрегация на прямом уступе: (а) – общая топология задачи; (б) – изометрия концентраций $C(x, y)$ в расчетной области; (с) – распределения $C(x, y_i)$, $y_i = 0.13, 0.25, 0.62, 0.64$ (кривые 1–4)

диффузия примесей не учитывается. Размерные параметры задачи: длина и ширина подложки Si (расчетной области $X-Y$) от 0.5 до 1.5 мкм; минимальная начальная и максимальная конечная толщины окисла 0.001 и 0.8 мкм, соответственно; скорость окисления 0.005 мкм/мин при давлении свободного O_2 10^5 Па и температуре окисления 1100 °С; начальные концентрации примесей от 10^{16} до 10^{22} см $^{-3}$. При проведении расчетов применялись нормировки: линейных размеров – к 1 мкм, времени – к 1 мин,

концентраций – к 10^{20} см $^{-3}$, что обеспечивает при необходимости пересчет полученной информации из безразмерной в размерную форму. Численное моделирование сегрегации, как правило, проводится для границы волн окисления, имеющей гладкий характер (непрерывные первая и вторая координатные производные) типа “птичьего клюва” (см., например, [7]). При проведении расчетов это приводит также к достаточно гладким распределениям концентраций примесей за и перед фронтом сегрегации в касательном к нему направлении. Однако на практике при разработке технологий построения полупроводниковых материалов с заданными свойствами в базовой подложке необходимо использовать выемки различной прямоугольной конфигурации, что приводит соответственно к конфигурациям границ окисел/материал, также имеющих прямые углы (в реальном смысле – участки с очень большим изменением кривизны, в формальном – имеющих разрывы первой производной). Расчет сегрегации на границах такой конфигурации, с одной стороны, является хорошим тестом для вычислительных методов и реализующих их компьютерных программ, а с другой стороны, полученные численные результаты весьма интересны в физическом плане и имеют важное практическое значение. Сегрегация на прямом уступе (рис.1) представляет некоторые результаты численного расчета динамики процесса сегрегации примесей на волне окисления SiO_2/Si , имеющей форму прямого уступа. Рис.1а представляет топологию задачи: заштрихованный участок занимает SiO_2 , граница которого от начала координат равномерно продвигается в глубь материала Si, втягивая в себя и перемещая за фронт (в область оксида SiO_2) помещенную в Si примесь В. Рис.1б иллюстрирует распределение примеси $C(x, y)$ в подложке (дальний угол рис.1б соответствует началу координат рис.1а): на границе окисла возникают узколокализованные канавообразные фронты распределения концентрации примеси. За этими фронтами на ровном выглаженном поле $C(x, y)$ в SiO_2 хорошо просматривается след траектории движения угловой точки типа “гребня” с максимальным значением в центре и резким убыванием вправо и влево (заметим, что данная конфигурация примеси является начальным условием для функционирования алгоритма расчета диффузии на данном временном слое, и можно прогнозировать высокие диффузионные потоки не только поперек фронта сегрегации, но и вдоль него, что предъявляет особые требования к качеству диффузионного расчета в данной подобласти и способам его проведения, с необходимостью сгущения рас-

четной сетки по двум координатным направлениям в зонах больших градиентов $C(x, y)$, что может оказаться с учетом динамики движения границы слишком завышенным и труднореализуемым требованием при организации решения полной задачи с расчетом процессов имплантации, окисления, сегрегации и диффузии). Рис.1с дает возможность точного количественного анализа. Здесь показаны одномерные распределения концентрации примеси $C(x, y_i)$ в момент времени $t = 40$ при некоторых фиксированных значениях $y_1 = 0.139$, $y_2 = 0.25$, $y_3 = 0.62$, $y_4 = 0.64$, представленных штриховыми линиями на рис.1а. Линии 1–3 проходят через область оксида SiO_2 ($x < 0.62$) и материала Si ($x > 0.66$), пересекая фронт волны окисления SiO_2/Si в точке $x = 0.64$. Соответственно, кривые 1–3, представляющие распределения $C(x, y_1)$, $C(x, y_2)$, $C(x, y_3)$, однотипны и имеют ровные “полки” со значениями $0.96 \cdot 10^{-4}$, на которых в месте пересечения линий $y_i = \text{const}$ и следа траектории движения угла фронта SiO_2/Si расположены “пики” с максимумом около $1.73 \cdot 10^{-4}$. На втором участке, при пересечении фронта SiO_2/Si , образуется “провал” с минимумом $0.3 \cdot 10^{-4}$ (зона сегрегации). На третьем участке в Si концентрации имеют фоновые значения 10^{-4} . Линия 4 проходит вдоль фронта SiO_2/Si ($x < 0.62$) и в Si ($x > 0.66$). Соответственно, кривая 4, представляющая распределение $C(x, y_4)$, имеет 3 участка: ровные “полки” со значениями $0.3 \cdot 10^{-4}$ на фронте SiO_2/Si и 10^{-4} в Si , и переходную область между ними на углу SiO_2/Si ($0.62 < x < 0.66$).

Сегрегация на обратном уступе (рис.2а) представляется обратным к процессу сегрегации на прямом уступе в том смысле, что хотя волна окисления SiO_2/Si вытягивает из материала Si в оксид SiO_2 легирующую примесь бора В, но конфигурация вытянутой массы в SiO_2 совершенно другая: эффект “гребня” заменяется эффектом “оврага”, когда при движении угла границы SiO_2/Si на следе ее траектории возникает подобласть (в данном случае – прямая линия) с минимальными значениями на фоне ровных значений $C(x, y)$ во всех остальных областях SiO_2 . На рис.2б хорошо просматриваются три “провала” – два на фронте SiO_2/Si и один – на следе его угла. Рис.2с дает возможность точного количественного анализа решения. Здесь показаны одномерные распределения концентрации примеси бора $C(x, y_i)$ в момент времени $t = 40$ при некоторых фиксированных значениях $y_1 = 0.12$, $y_2 = 0.41$, $y_3 = 0.64$, $y_4 = 0.82$, представленных штриховыми линиями на рис.2а. Линии 1, 2 проходят через область оксида SiO_2 , линия 3 – в области SiO_2 ($x < 0.64$) и вдоль

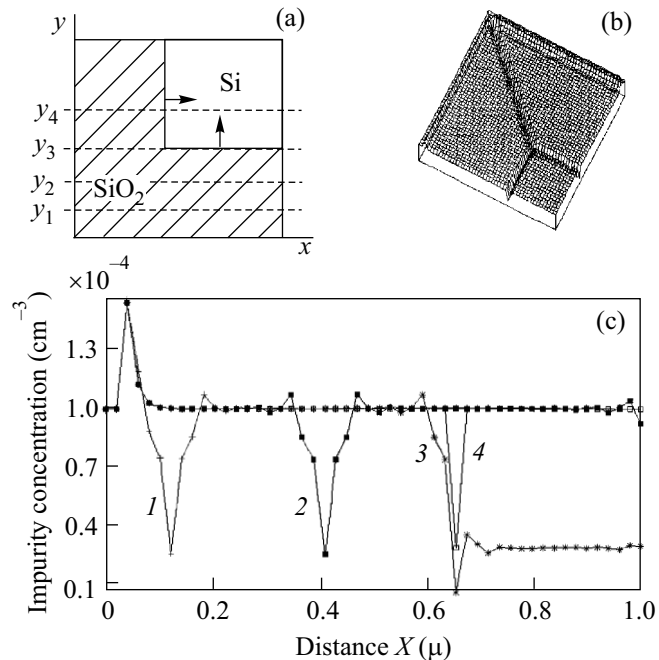


Рис.2. Сегрегация на обратном уступе: (а) – общая топология задачи; (б) – изометрия концентраций $C(x, y)$ в расчетной области; (с) – распределения $C(x, y_i)$, $y_i = 0.12, 0.41, 0.64, 0.82$ (кривые 1–4)

фронта SiO_2/Si ($x > 0.64$), линия 4 – в областях SiO_2 ($x < 0.64$) и Si ($x > 0.64$), пересекая фронт SiO_2/Si в точке $x = 0.64$. Кривые 1, 2 (рис.2с), представляя распределения $C(x, y_1)$ и $C(x, y_2)$ в SiO_2 , фактически иллюстрируют всю предысторию движения границы SiO_2/Si “вправо – вверх” (см. рис.2а): на ровной “полке” значений 10^{-4} в окрестности пересечения линии $y_i = \text{const}$ и следа траектории движения угла фронта SiO_2/Si (точки $x = 0.12$ и $x = 0.41$ для кривых 1, 2, соответственно) возникают в подобласти “провала” значений $C(x, y_i)$, имеющие одну и ту же форму и одинаковый минимум $0.3 \cdot 10^{-4}$ (заметим для полноты анализа, что пики значений с максимумом $1.6 \cdot 10^{-4}$ при $x = 0.04$ определяются начальной конфигурацией задачи и для дальнейшего особого значения не имеют). Распределение $C(x, y_3)$ в подобласти SiO_2 имеет тот же тип – “полку” 10^{-4} , в подобласти $x > 0.7$ (фронт SiO_2/Si) также имеет место ровная “полка”, но со значениями $0.3 \cdot 10^{-4}$. Между ними существует переходная область ($0.6 < x < 0.7$) с наличием глубокого минимума $0.095 \cdot 10^{-4}$ при $x = 0.64$, где расположен угол границы SiO_2/Si и, соответственно, имеет место более сильная сегрегация – инжекция В через фронты сразу в двух (x и y) направлениях. Кривая 4 имеет “стандартный” вид: “полка” 10^{-4} в SiO_2 ($x < 0.62$) и

Si ($x > 0.66$) и переходная область ($0.62 < x < 0.66$) на фронте SiO₂/Si с ровным, симметричным “треугольным провалом” до $0.3 \cdot 10^{-4}$.

Сегрегация в каверне типа “траншея”. Процесс сегрегации примесей на таком типе конфигурации границы окисления (см. рис.3а), весьма близком к использующимся в технологиях создания полупро-

ни $t = 40$ координаты двух выпуклых углов границы (0.2, 0.5) и (0.8, 0.5), соответственно). Кривая имеет кусочно-постоянный вид с центральной “полкой” $0.3 \cdot 10^{-4}$ в диапазоне (0.22, 0.78) и опирается на “полки” фоновых значений концентраций 10^{-4} в диапазонах [0, 0.2] и [0.8, 1]. Кривая 2 рис.3с представляет распределение $C(x, y_2)$ на луче $y_2 = 0.62$, который проходит через области Si ($x < 0.2$ и $x > 0.8$) и SiO₂ ($0.2 < x < 0.8$) и пересекает фронты сегрегации в точках $x = 0.2$ и $x = 0.8$. На участках Si концентрации имеют фоновые значения 10^{-4} , на фронтах имеет место “провал” концентраций до значений $0.3 \cdot 10^{-4}$, в области SiO₂ концентрация возрастает до значений 10^{-4} , при этом в подобласти SiO₂ существуют участки с пиками концентраций с максимальным значением концентраций около $1.7 \cdot 10^{-4}$ в точках пересечения луча $y = y_2$ со следом траектории движения угла фронта SiO₂/Si $x = 0.35$ и $x = 0.65$. Кривые 3 и 4 представляют $C(x, y_3)$ и $C(x, y_4)$ на лучах, лежащих в Si ($x < 0.2$ и $x > 0.8$), в SiO₂ в x -диапазонах (0.2, 0.42) и (0.58, 0.8) и пересекающих фронты при $x = 0.2$ и $x = 0.8$. В подобласти $x \in (0.42, 0.58)$ луч y_3 проходит вдоль начального фронта SiO₂/Si, а луч y_4 лежит в области начального положения оксида SiO₂, пересекая положение его начальных фронтов в точках $x = 0.42$ и $x = 0.58$. Соответственно к этим координатам смещаются пики концентраций на кривых 3 и 4, при этом в углах начального положения SiO₂/Si достигается абсолютный максимум концентраций, до $2 \cdot 10^{-4}$. Картины распределений $C(x, y)$ на лучах $x = \text{const}$, то есть в другом координатном направлении, представлены на рис.3д. Кривая 1 соответствует значениям $C(x_1, y)$ на линии симметрии задачи $x_1 = 0.5$. Этот луч (см. рис.3а) проходит через область материала Si ($y < 0.5$), пересекает фронт SiO₂/Si в точке $y = 0.5$ и далее проходит через область оксида SiO₂ ($y > 0.5$), причем в ее двух подобластях – подобласти, в которой во время решения задачи произошло окисление ($0.5 < y < 0.75$), и начальной подобласти оксида ($y > 0.75$). Этим зонам соответствуют вариации значений концентраций: в области Si $C(x_1, y)$ имеет фоновые значения 10^{-4} , на фронте происходит падение, и пиковое значение $C(x_1, y)$ достигает величины $0.3 \cdot 10^{-4}$, в первой подобласти SiO₂ $C(x_1, y)$ возрастает до “полки” со значением 10^{-4} и пиком $1.5 \cdot 10^{-4}$ при $x = 0.75$, а в подобласти начального оксида $C(x_1, y)$ вновь имеет фоновое значение 10^{-4} . Кривая 2 рис.3д представляет значения $C(x_2, y)$ на луче $x_2 = 0.67$, проходящем через области Si ($y < 0.5$) и SiO₂ ($y > 0.5$) и пересекающем фронт SiO₂/Si при $y = 0.5$. В области Si концентрация имеет фоновое значение 10^{-4} , на

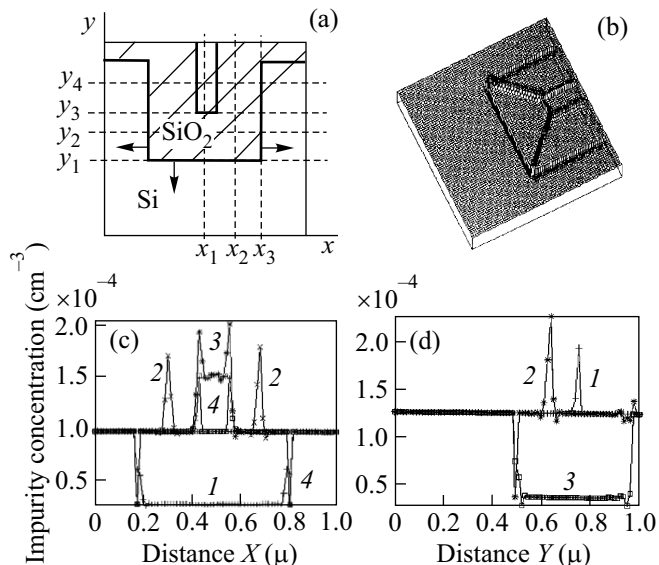


Рис.3. Сегрегация на каверне типа “траншея”: (а) – общая топология задачи; (б) – изометрия концентраций $C(x, y)$ в расчетной области; (с) – распределения $C(x, y_i)$, $y_i = 0.5, 0.62, 0.75, 0.86$ (кривые 1–4); (д) – распределения $C(x_i, y)$, $x_i = 0.5, 0.67, 0.8$ (кривые 1–3)

водниковых материалов, имеет характерные черты, свойственные рассмотренным выше процессам сегрегации на прямом и обратном уступах. Рис.3б достаточно полно в качественном плане иллюстрирует образующиеся на фронтах SiO₂/Si структуры вытягивания примеси бора из материала в окисел: прямые “провалы” $C(x, y)$ собственно на границах движения волны окисления и “гребни” на траектории движения выпуклых углов фронта. Количественный анализ распределения концентраций $C(x, y)$ в расчетной области можно провести на одномерных графиках сечений $C(x, y)$ лучами $y = \text{const}$ (0.5, 0.62, 0.75, 0.86) и $x = \text{const}$ (0.5, 0.67, 0.8) соответственно для рис.3с и рис.3д. Кривая 1 рис.3с, представляющая значения $C(x, y_1)$, проходит вдоль фронта SiO₂/Si (см. рис.3а), причем ее центральный участок ($0.2 < x < 0.8$) лежит собственно на фронте, а ее левый ($x < 0.2$) и правый ($x > 0.8$) участки находятся в области Si (укажем, что для представляемого момента време-

фронте происходит ее падение до $0.33 \cdot 10^{-4}$ и затем восстановление до “полки” со значением 10^{-4} , на которой дислоцируется пик с максимальным значением $1.8 \cdot 10^{-2}$, в точке с $y = 0.67$ (пересечение луча x_2 со следом траектории движения угла фронта SiO_2/Si). Кривая 3 рис.3d представляет значения $C(x_3, y)$ на луче $x_3 = 0.8$. Этот луч проходит (см. рис.3a) через область материала Si ($y < 0.5$), далее идет вдоль фронта волны SiO_2/Si ($0.5 < y < 0.8$) и затем проходит через область оксида SiO_2 ($y > 0.8$). Соответственно в области Si $C(x_3, y)$ имеет постоянное фоновое значение 10^{-4} , на втором участке происходит падение значений $C(x_3, y)$ от 10^{-4} до $0.3 \cdot 10^{-4}$. Заметим, что кривая на этом участке также имеет вид “полки”, далее наблюдается рост $C(x_3, y)$ до максимального значения $1.1 \cdot 10^{-4}$, которое достигается в вогнутом угле конфигурации границы, куда дополнительно выталкивается часть примеси. При прохождении через фронт SiO_2/Si в область начального положения SiO_2 , естественно, происходит падение $C(x_3, y)$ до фоновых.

Сегрегация на каверне типа “квадрат”. В отличие от приведенных выше, данная конфигурация (см. рис.4a) представляет собой замкнутую область оксида, окруженную со всех сторон областью вещества. Заметим, что геометрическая форма процесса окисления типа “квадрат” так же, как и типа “траншея”, часто применяется в технологиях разработки полупроводниковых материалов. В качественном плане процесс сегрегации примесей на подвижной границе SiO_2/Si иллюстрируется изометрией рис.4b. Общая картина процесса характеризуется наличием четырех фронтов окисления, движущихся от центра к периферии, четырех стационарных следов начальных положений фронтов SiO_2/Si и четырех полудиагоналей – следов траекторий движения угловых точек. Структуры концентраций $C(x, y)$ характеризуются “провалами” на фронтах, “гребнями” на полудиагоналях и ровным выглаженным полем между ними. Количественный анализ распределения концентраций примесей $C(x, y)$ в подложке можно провести на одномерных графиках сечений $C(x, y_i)$ лучами ($y_1 = 0.2, y_2 = 0.3, y_3 = 0.5$) в момент времени $t = 50$ (рис.4c). Кривая 1, представляющая значения $C(x, y_1)$, проходит в областях материала Si ($x < 0.2$ и $x > 0.8$) и вдоль фронта SiO_2/Si ($0.2 < x < 0.8$). График такой зависимости, как и ранее, представляет собой “полку” со значением $0.3 \cdot 10^{-4}$ во второй (центральной) подобласти, переходящую слева и справа на “полки” постоянных фоновых значений 10^{-4} . Кривая 2 (рис.4c) представляет распределение $C(x, y_2)$, имеющее два “провала” до значений $0.3 \cdot 10^{-4}$ на фрон-

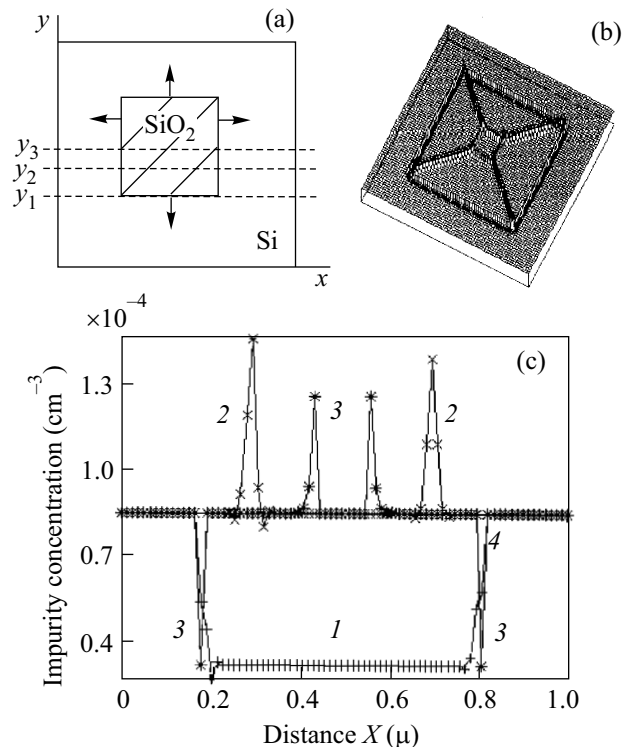


Рис.4. Сегрегация на каверне типа “квадрат”: (a) – общая топология задачи; (b) – изометрия концентраций $C(x, y)$ в расчетной области; (c) – распределения $C(x, y_i)$, $y_i = 0.2, 0.3, 0.5$ (кривые 1–3)

тах SiO_2/Si ($x = 0.2$ и $x = 0.8$) и два “пика” интенсивностью около $1.8 \cdot 10^{-4}$ в точках пересечения луча y_2 и следа траектории угла фронта ($x = 0.3$ и $x = 0.7$). Между “провалами” и “пиками” концентрации имеют фоновое значение 10^{-4} . Небольшая разница в величинах правого и левого “пиков” определяется алгоритмом расчета и связана с выбором порядка обхода границы SiO_2/Si : по или против часовой стрелки (подробнее см. [1]). Кривая 3 (рис.4c) показывает распределение $C(x, y_3)$. Эта кривая также симметрична относительно $x = 0.5$ и имеет 5 характерных участков: участка в Si ($x < 0.2$), пересечение фронтов SiO_2/Si ($x = 0.2$ и $x = 0.8$), область в SiO_2 ($0.2 < x < 0.8$) с подобластью начального положения оксида ($0.45 < x < 0.55$). В области Si и SiO_2 концентрации $C(x, y_3)$ имеют фоновые значения 10^{-4} , на фронтах сегрегации имеет место “провал” до значений $0.3 \cdot 10^{-4}$. На фронтах исходного положения границы SiO_2/Si ($x = 0.45$ и $x = 0.55$) имеет место “всплеск” концентраций до значений $1.55 \cdot 10^{-4}$, образовавшихся в начальный период движения волны окисления. Отметим, что природа возникновения “пиков” на кривых 2 и 3 различна.

-
1. Г. А. Тарнавский, С. И. Шпак, М. С. Обрехт, Выч. мет. и программ. **2**, 12 (2001) (Интернет-журнал: <http://www.srcc.msu./num-meth>).
 2. P. Deroux-Dauphin and J. P. Gonchand, J. Electrochem. Soc. **131**, 1418 (1984).
 3. R. B. Fair and J. C. C. Tsai, J. Electrochem. Soc. **127**, 2243 (1980).
 4. K. Tanigushi, K. Kurosawa, and M. Kashiwagi, J. Electrochem. Soc. **125**, 2050 (1978).
 5. A. Seidl and M. Svoboda, IEEE Trans. Elec. Dev. **ED-32**, 1960 (1985).
 6. Dao Khac An and F. Pavlyak, Phys. Stat. Sol. **a95**, K117 (1986).
 7. В. И. Кольдяев, В. А. Мороз, С. А. Назаров, Автометрия **3**, 46 (1988).
 8. В. Н. Чеботин, *Физическая химия твердого тела*, М.: Наука, 1982.
 9. Г. Э. Цырлин, П. Вернер, Г. Гозеле и др., Письма в ЖТФ **27**, 31 (2001).
 10. Е. В. Астрова, В. В. Ратников, А. Д. Ременюк и др., Письма в ЖТФ **27**, 1 (2001).