

## Аномальное распределение германия, имплантированного в диэлектрический слой структуры КНИ, после отжига радиационных дефектов

© Е.Л. Панкратов<sup>\*¶</sup>, О.П. Гуськова<sup>+¶¶</sup>, М.Н. Дроздов<sup>°</sup>, Н.Д. Абросимова<sup>+</sup>, В.М. Воротынец<sup>◇</sup>

\* Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
603950 Нижний Новгород, Россия

+ Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова,  
603950 Нижний Новгород, Россия

° Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
603950 Нижний Новгород, Россия

◇ Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева  
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 17 июля 2013 г. Принята к печати 20 августа 2013 г.)

Исследован профиль распределения германия в структуре Si/SiO<sub>2</sub>/Si после имплантации <sup>74</sup>Ge в диэлектрический слой SiO<sub>2</sub>, сращивания с приборным слоем Si и высокотемпературного отжига. Обнаружены аномально высокий перенос и накопление атомов <sup>74</sup>Ge у границы SiO<sub>2</sub>/Si, удаленной от границы сращивания. Наблюдаемое распределение <sup>74</sup>Ge не укладывается в рамки существующей модели диффузии Ge в Si и SiO<sub>2</sub> при постимплантационном отжиге. Предложена модифицированная модель диффузии атомов Ge вблизи границ Si/SiO<sub>2</sub>, качественно объясняющая наблюдаемые особенности.

### 1. Введение

Реализация всех преимуществ МОП (металл–окисел–полупроводник) транзистора на основе структур КНИ (кремний–на–изоляторе), заключающихся в уменьшении паразитных емкостей, значительном увеличении стойкости к случайным единичным отказам, осуществляется при использовании конструкции, в которой стоковые области достигают скрытого окисла. Конструктивной особенностью МОП транзистора, сформированного на структуре КНИ, является наличие паразитного транзистора, подзатворным диэлектриком которого является захороненный окисел, а затвором является изолированная подложка. При такой конструкции существенное влияние на работу активного транзистора оказывает заряд, накопленный в диэлектрике при облучении. Для снижения эффектов, связанных с зарядкой диэлектрика при воздействии ионизирующего излучения, применяется ионная имплантация диэлектрических слоев, направленная на создание центров захвата отрицательного заряда в диэлектрике.

Параметры центров захвата (сечение захвата и вид захватываемых носителей), которые образуют атомы внедряемой примеси в композициях КНИ, определяются матрицей, в которую они встраиваются. При этом определяющее значение имеют процессы постимплантационного отжига, сопровождающиеся перераспределением примеси в структуре КНИ.

В ряде работ, посвященных модификации слоев SiO<sub>2</sub> в составе структур кремний/диоксид кремния атомами германия с последующим высокотемпературным отжигом, отмечено, что германий имеет свойство диффунди-

ровать к границе раздела Si/SiO<sub>2</sub> [1,2]. Однако остается не до конца изученным вопрос о механизмах диффузии, приводящих к этому эффекту. В работе [3] были проведены квантово-химические расчеты различных механизмов встраивания германия в матрицу нестехиометрического окисла. На основании этих расчетов сделаны предположения о возможных причинах преимущественного встраивания германия на границе раздела Si/SiO<sub>2</sub>.

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований структур КНИ с диэлектриком, имплантированным ионами Ge, методом ВИМС (вторично-ионной масс-спектрометрии). С целью изучения процессов перераспределения германия, имплантированного в слой SiO<sub>2</sub> структуры КНИ в процессе отжига радиационных дефектов, проведено математическое моделирование процесса отжига радиационных дефектов.

### 2. Методика эксперимента

Объектами измерений являлись структуры КНИ, изготовленные в ИФП СО РАН. Структуры были изготовлены методом Delecut, толщина отсеченного слоя кремния  $a_1 = 200$  нм, захороненного диэлектрика  $a_2 = 400$  нм. Захороненный окисел этих структур до выполнения операции сращивания был подвергнут имплантации ионов германия с энергией 40 кэВ. Доза имплантации составляла  $1 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>. Готовые структуры были отожжены в атмосфере азота в течение 40 мин при температуре 1100 °С.

Послойный элементный анализ проводился методом ВИМС на установке TOF.SIMS-5 фирмы IONTOF (Германия) с времяпролетным масс-анализатором. В этой

¶ E-mail: elp2004@mail.ru

¶¶ E-mail: smelovaop@mail.ru

установке используется импульсный режим работы ионных пучков и масс-анализатора, в котором разделены функции двух ионных пучков для анализа и распыления. Распыление проводится ионами  $O^{2+}$  или  $Cs^+$  с энергиями от 0.5 до 2 кэВ соответственно, а величина тока составляет сотни нА. Типичный размер раstra распыляющего пучка применяется от  $200 \times 200$  до  $500 \times 500$  мкм<sup>2</sup>. Для анализа используются ионы  $Vi^+$  с энергией 25 кэВ, величина тока пучка ионов  $Vi$  в импульсе не превышает 1 пА, длительность импульса 1 нс. При этих условиях в одном зондирующем импульсе содержится около 500 ионов  $Vi$ , поэтому анализирующий пучок с высокой энергией практически не нарушает поверхность, а формирование измененного приповерхностного слоя и результирующее разрешение по глубине определяются низкоэнергетическими ионными пучками. Размер раstra ионов  $Vi$  составляет около 5% от раstra распыляющего пучка. Система юстировки ионных пучков в TOFSIMS-5 позволяет с высокой точностью позиционировать анализирующий пучок в центре кратера распыления, что минимизирует инструментальные погрешности при послойном анализе.

Диапазон регистрируемых масс вторичных ионов составляет от 1 до 10000 а.е.м., относительное разрешение по массам  $M/\Delta M = 10000$ . Это позволяет однозначно идентифицировать все изотопы элементов, а также отличать кластерные вторичные ионы, состоящие из нескольких атомов, от элементарных ионов в случае, когда их атомная масса составляет одинаковое число целых единиц. Чувствительность метода составляет  $10^{16}$  см<sup>-3</sup> и колеблется в зависимости от типа примеси. Предельное разрешение по глубине для установки TOFSIMS-5 составляет около 1 нм, для переходной границы структур КНИ реализовано разрешение в диапазоне 2–4 нм.

### 3. Экспериментальные результаты

На рис. 1 приведены профили распределения атомов германия  $^{74}Ge$  в составе структур КНИ, диэлектрик которых был подвергнут имплантации ионов  $Ge^+$  с энергией 40 кэВ и дозой  $D = 1 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>. Эти профили были получены при распылении ионами  $O^{2+}$  с энергией 2 кэВ. Анализ проводился в положительной моде регистрации. Калибровка скорости распыления и определение масштаба глубины профилей для структур КНИ проводились отдельно для слоев Si и SiO<sub>2</sub> на дополнительных тестовых структурах. Интенсивность Ge приводится в относительных единицах, поскольку количественная калибровка концентрации Ge в слое SiO<sub>2</sub> для TOFSIMS-5 отсутствует. Ориентировочно, концентрация  $^{74}Ge$  в максимуме составляет порядка  $10^{20}$  ат/см<sup>3</sup>.

Отметим следующие особенности профиля  $^{74}Ge$  на рис. 1, *a* и *b*.

1. „Расщепление“ максимума распределения Ge на два пика, один из которых остается, по нашим оценкам, на первоначальной глубине имплантации Ge, второй

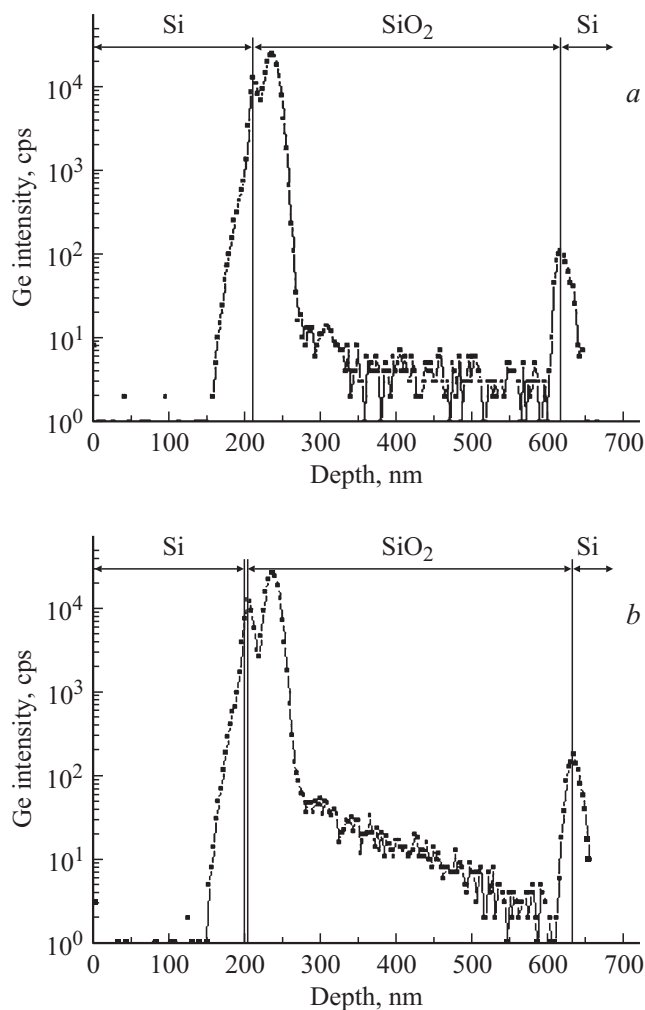


Рис. 1. Профиль распределения по глубине ионов  $^{74}Ge$  в пластине КНИ ( $Ge^+$ ,  $E = 40$  кэВ,  $D = 1 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>). *a* — *p*-тип проводимости приборного слоя, *b* — *n*-тип проводимости приборного слоя.

находится на границе срачивания Si–SiO<sub>2</sub> ( $d \approx 200$  нм). Кроме того, наблюдается проникновение Ge и в верхний приборный слой Si.

2. Вблизи второй границы SiO<sub>2</sub>–Si ( $d \approx 600$ – $650$  нм) наблюдается накопление атомов Ge, на 2 порядка превышающее концентрацию Ge перед этим „всплеском“.

Первая особенность вблизи границы срачивания наблюдалась в работе [4], где методом резерфордского обратного рассеяния было обнаружено смещение максимума имплантированного в SiO<sub>2</sub> Ge к границе приборного слоя Si. Для объяснения этого эффекта в работе [4] предложена модель ускоренной сегрегации через расплав Ge, удовлетворительно объяснившая накопление Ge на границе Si–SiO<sub>2</sub>. Вторая особенность, т.е. накопление Ge на границе SiO<sub>2</sub>–Si, удаленной от поверхности срачивания, в работе [4] не рассматривается. В работе [2] исследуется формирование однородного распределения Ge в слое SiO<sub>2</sub> путем использования значительно более высокой энергии имплантации

ионов Ge — 230 и 450 кэВ. Поэтому результаты работы [2] следует трактовать как возникновение провала в монотонном распределении Ge вблизи границы SiO<sub>2</sub>–Si с падением концентрации Ge примерно в 5 раз от его максимального значения. В данной работе спад Ge от максимального значения в направлении второй границы SiO<sub>2</sub>–Si ( $d \approx 500\text{--}600$  нм) составляет около 10<sup>4</sup> раз, поэтому дальнейший всплеск и накопление Ge на второй границе SiO<sub>2</sub>–Si требует дополнительного рассмотрения и обсуждения.

#### 4. Обсуждение результатов

Оценим расстояние, которое могут преодолеть атомы германия при диффузии в диоксиде кремния за время 40 мин. Рассчитав времена оседлости атомов по формуле

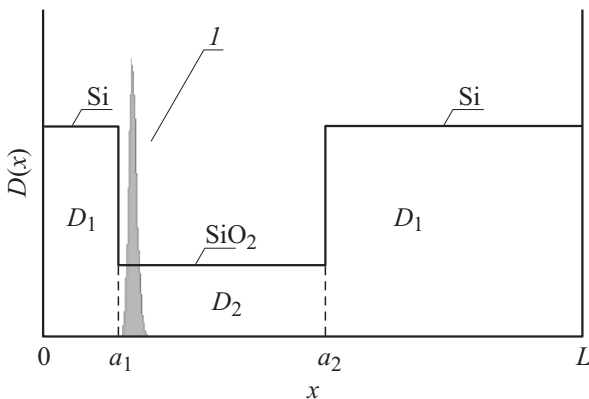
$$\tau = \nu_0^{-1} \exp(E_{\text{event}}/k_B T), \quad (1)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана  $k_B = 8.62 \cdot 10^{-5}$  эВ/К,  $T$  — абсолютная температура,  $E_{\text{event}}$  — энергия активации,  $\nu_0$  — дебаевская частота  $\nu_0 = 10^{13}$  Гц.

Таким образом, за время 40 мин атом германия может сделать порядка 10<sup>6</sup> прыжков и преодолеть расстояние, превышающее толщину слоя SiO<sub>2</sub>.

Из наших оценок следует, что атомы германия вполне могут проникнуть в кремний, однако остаются неясными причины скопления германия на границе „кремний/захороненный окисел“.

Для построения теоретической модели диффузии атомов германия в диоксиде кремния необходимо получить распределение внедренных атомов в начальный момент времени. С этой целью нами было проведено моделирование процесса ионной имплантации методом Монте–Карло в программе TRIM. Параметры расчетов соответствовали экспериментальным параметрам ионной имплантации ( $E = 40$  кэВ). Профиль распределения концентрации внедренных атомов германия представлен на рис. 2.



**Рис. 2.** Структура Si/SiO<sub>2</sub>/Si с начальным (до отжига) распределением имплантированного германия.  $D_1$  и  $D_2$  — значения коэффициента диффузии германия в Si и SiO<sub>2</sub> соответственно.  $I$  — начальное (до отжига) распределение Ge.

Согласно [4,5] коэффициенты диффузии германия в кремнии ( $D_1(\text{Ge})$ ) и диоксиде кремния ( $D_2(\text{Ge})$ ) составляют соответственно:

$$D_1(\text{Ge}) = 7.55 \cdot 10^3 \exp(-5.08/k_B T), \quad (2)$$

$$D_2(\text{Ge}) = 8.9 \cdot 10^{-3} \exp(-3.9/k_B T). \quad (3)$$

Отсюда следует, что германий, достигнув границы Si/SiO<sub>2</sub>, должен диффундировать в слой кремния. Однако следует учитывать, что в результате имплантации могут образовываться кремниево-кислородно-германиевые комплексы с напряженными и оборванными связями. В таких условиях энергия активации диффузии, а следовательно, и коэффициент диффузии зависят от ближайшего окружения и степени окисления атомов германия и кремния. В связи с этим, физически оправданным является введение условий, накладываемых на коэффициент диффузии в приграничной области.

В настоящей работе коэффициент диффузии изменяется от коэффициента, соответствующего диоксиду кремния ( $D_2(\text{Ge})$ ), до коэффициента, соответствующего кремнию ( $D_1(\text{Ge})$ ) в приграничной области, по следующему закону:

$$D(x) = D_0[1 + \varepsilon g(x)], \quad (4)$$

где  $D_0$  — среднее значение коэффициента диффузии,  $|g(x)| \leq 1$ ,  $0 \leq \varepsilon < 1$ , параметр  $\varepsilon$  характеризует величину отклонения диффузии от среднего значения.

Опишем динамику перераспределения германия в представленной на рис. 2 структуре с помощью второго закона Фика в следующей форме:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(x) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right], \quad (5)$$

с граничными и начальными условиями

$$\left. \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad C(x, 0) = f(x). \quad (6)$$

В соотношениях (4) и (5) введены следующие обозначения:  $C(x, t)$  — пространственно-временное распределение концентрации германия;  $D(x)$  — коэффициент диффузии германия, величина которого зависит от свойств материалов слоев рассматриваемой структуры. Точного решения уравнения (5) не существует. Традиционное использование граничных условий 4-го рода при анализе процессов в многослойных структурах приводит к необходимости решения не имеющих точного решения трансцендентных уравнений для определения постоянных интегрирования [6,7]. Еще одной особенностью применения данных граничных условий является необходимость использования приближения идеально резких границ раздела между слоями рассматриваемой многослойной структуры, которое в данном случае не выполняется. По этой причине рассмотрим альтернативный метод решения уравнения (5). Далее решение

уравнения (4) будем искать в виде степенного ряда по параметру  $\varepsilon$  [6–8]. Следует заметить, что данный степенной ряд будет сходиться при любом значении параметра  $\varepsilon$  в силу положительности коэффициента диффузии.

Подстановка ряда (3) в уравнение (4) и условия (5), а также группировка коэффициентов при одинаковых степенях параметра  $\varepsilon$  позволяют получить уравнения и условия для функций  $C_i(x, t)$  в следующей форме:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_0(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C_0(x, t)}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial C_i(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C_i(x, t)}{\partial x^2} + D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[ g(x) \frac{\partial C_{i-1}(x, t)}{\partial x} \right], \end{cases} \quad i \geq 1, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial C_i(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= \left. \frac{\partial C_i(x, t)}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad i \geq 0; \\ C_0(x, 0) &= \chi(x), \quad C_i(x, 0) = 0, \quad i \geq 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Решение уравнений (6) с условиями (7) стандартными методами [6,7,12] позволяет представить их следующим образом:

$$C_0(x, t) = \frac{F_0}{L} + \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} F_n \cos\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \exp\left(-\pi^2 n^2 \frac{D_0 t}{L^2}\right), \quad (9)$$

$$\begin{aligned} C_i(x, t) &= -\frac{2\pi}{L^2} \sum_{n=1}^{\infty} n F_n \cos\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \exp\left(-\pi^2 n^2 \frac{D_0 t}{L^2}\right) \\ &\times \int_0^t \left(\pi^2 n^2 \frac{D_0 \tau}{L^2}\right) \int_0^L g(v) \frac{\partial C_{i-1}(v, \tau)}{\partial v} \sin\left(\frac{\pi n v}{L}\right) dv d\tau, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\text{где } F_n = \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{\pi n x}{L}\right) dx.$$

## 5. Результаты анализа

Из экспериментальных данных следует, что на расстоянии примерно 50 нм по обе стороны от границы сращивания „приборный слой/захороненный окисел“ наблюдается область, насыщенная германием. На второй границе „захороненный окисел/подложка“ ширина этой области в 2 раза меньше вследствие меньшей концентрации германия. На основании проведенных измерений для структур КНИ с приборным слоем  $p$ - и  $n$ -типа проводимости установлено, что легирующая примесь не приводит к существенному влиянию на процессы перераспределения германия в структуре КНИ.

На основе полученного решения уравнения (5) проведем анализ перераспределения имплантированного в структуру германия в процессе отжига радиационных дефектов (рис. 2). На рис. 3 приведен профиль распределения концентрации германия в структуре КНИ,

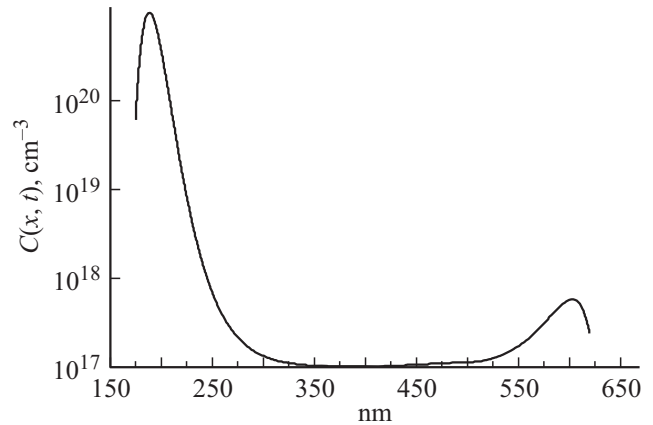


Рис. 3. Распределение по глубине концентрации германия после отжига длительностью 40 мин при энергии ионов 40 кэВ и дозе  $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ .

выявлено стандартное при отжиге радиационных дефектов уширение распределения концентрации германия, а также его асимметризация из-за разницы в значениях коэффициента диффузии германия в слоях рассматриваемой структуры.

## 6. Заключение

В данной работе с помощью ВИМС измерений обнаружена область, насыщенная германием не только на границе сращивания „приборный слой/захороненный окисел“, но и на границе „захороненный окисел/подложка“.

Для объяснения обнаруженных закономерностей проведено моделирование постимплантационного отжига структуры КНИ с модифицированным захороненным диэлектриком.

Результатом вычислений являлось построение двумерного профиля распределения концентрации примеси по глубине в структуре КНИ.

Непосредственное численное сопоставление теоретических и экспериментальных данных невозможно вследствие отсутствия калибровки ВИМС сигнала  $^{74}\text{Ge}$  в слое  $\text{SiO}_2$  для установки TOF.SIMS-5.

Однако особенности экспериментально полученного профиля интенсивности сигнала  $^{74}\text{Ge}$  наблюдаются и для теоретического профиля, а именно:

- наличие на границе сращивания пика концентрации Ge ( $d \approx 200 \text{ нм}$ );
- проникновение Ge в приборный слой Si;
- наличие второго пика концентрации ( $d \approx 600\text{--}650 \text{ нм}$ ) на границе „захороненный окисел/подложка“.

Кроме того, наблюдается хорошее качественное соответствие между ходом теоретического и экспериментального профиля распределения  $^{74}\text{Ge}$  по глубине.

Удовлетворительное согласование теоретических и экспериментальных результатов дает возможность говорить о наличии в некоторой области вблизи границы

Si/SiO<sub>2</sub> переменного элементного состава, описываемого переменным коэффициентом диффузии.

Работа выполнена при поддержке гранта правительства РФ № 11.G34.31.0066 и гранта Ведущие научные школы России НШ-339.2014.2.

## Список литературы

- [1] И.Е. Тыщенко, М. Фельсков, А.Г. Черков, В.П. Попов. ФТП, **41**, 301 (2007).
- [2] A. Markwitz, L. Rebohle, H. Hofmeister. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **147**, 361 (1999).
- [3] О.П. Гуськова, В.М. Воротынцев, Е.Л. Шоболов, Н.Д. Абросимова. ФТП, **46** (4), (2012).
- [4] И.Е. Тыщенко, М. Фельсков, А.Г. Черков. ФТП, **43**, 58 (2009).
- [5] M. Ogino, Y. Oana, M. Watanabe. Phys. Status. Solidi A, **72**, 535 (1982).
- [6] А.И. Райченко. *Математическая теория диффузии в приложениях* (Киев, Наук. думка, 1981).
- [7] Г. Карслоу, Д. Егер. *Теплопроводность твердых тел* (М., Наука, 1964).
- [8] E.L. Pankratov. Phys. Rev. B, **72**, 075 201 (2005).
- [9] E.L. Pankratov. J. Comp. Theor. Nanosci. **9**, 41 (2012).
- [10] E.L. Pankratov, E.A. Bulaeva. Int. J. Nanosci. **11**, 1250 028 (2012).
- [11] E.L. Pankratov, E.A. Bulaeva. Rev. Theoretical Sci., **1**, 58 (2013).
- [12] А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. *Уравнения математической физики* (М., Наука, 1972).

Редактор Т.А. Полянская

## Anomalous distribution of germanium implanted in SOI dielectric layer after radiation defects annealing

E.L. Pankratov\*, O.P. Guskova<sup>+</sup>, M.N. Drozdov<sup>o</sup>,  
N.D. Abrosimova<sup>+</sup>, V.M. Vorotynev<sup>d</sup>

\* Nizhny Novgorod State University,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

<sup>+</sup> Scientific-Research Institute for Measuring Systems,  
GSP-486, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

<sup>o</sup> Institute for Physics of Microstructure,  
Russian Academy of Sciences,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

<sup>d</sup> Nizhny Novgorod State Technical University,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** Researched profile of distribution of germanium atoms in Si/SiO<sub>2</sub>/Si structure after implantation <sup>74</sup>Ge in dielectric layer SiO<sub>2</sub>, bonding with device layer Si and high temperature annealing. Revealed anomalous high transportation and accumulation of atoms <sup>74</sup>Ge near SiO<sub>2</sub>/Si boundary outlying from bonded boundary. Detecting distribution of <sup>74</sup>Ge beyond diffusion model Ge in Si and SiO<sub>2</sub> after postimplantation annealing. Proposed modified model of diffusion Ge atoms near boundfary's Si/SiO<sub>2</sub>, qualitatively explanated revealed features.