

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ПРОФИЛЕЙ  
РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННОЙ ДИФФУЗИИ  
ПРИМЕСЕЙ ДЛЯ СЛУЧАЯ БЫСТРОГО  
ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА

Шишияну Ф. С., Показной И. И.,  
Смирнов Е. В., Чебан В. В., Шонтя В. П.

Во время отжига ионно-легированных слоев из радиационных повреждений образуются точечные дефекты (ТД), увеличивающие коэффициент диффузии [1]. ТД приводят к тому, что параметры, от которых зависит коэффициент диффузии, становятся зависимыми от координаты или концентрации. Влияние неравномерной генерации вакансий на распределение примеси в начальные моменты времени было доказано в работе [2]. Используемый в настоящее время быстрый термический отжиг для активации имплантированных примесей проводится при длительностях, сравнимых с временем жизни ТД [3, 4].

Большинство предложенных моделей радиационно-стимулированной диффузии (РСД) разработано для Si, они учитывают в упрощенном виде координатную зависимость коэффициента диффузии [5], допускают целый ряд предположений [6] и рассматриваются для случая больших длительностей эксперимента [7]. Для соединений АШВ<sup>4</sup>, где концентрация ТД, в том числе вакансий, может достигать  $\sim 10^{17}$  см<sup>-3</sup> и после процесса имплантации ТД могут быть распределены неравномерно в приповерхностной области кристалла, пре-небречь их влиянием на диффузию недопустимо.

В работе предлагается модель РСД для численного расчета профилей примесей, учитываяющая, что активация происходит при режимах, когда длительность обработки составляет от 0.01 до нескольких десятков секунд. Рассматривается случай, когда в результате ионной бомбардировки ионами легирующей примеси или ионами инертных газов в приповерхностной области GaAs образуются дефекты, при распаде которых формируются наиболее простые ТД — вакансии (ВД) и междоузельные атомы, а их профиль аппроксимируется функцией Гаусса. Допускается, что концентрация вакансий убывает во времени со скоростью  $k$  в области залегания ионов

$$N_v(x, t) = N_v(x) - Kt, \quad K = [N_v(x) - N_v^*]/\tau_v, \quad (1)$$

где  $\tau_v$  — среднее время жизни вакансий,  $N_v(x, t)$  — концентрация вакансий, рождающихся во время отжига радиационных повреждений,  $N_v^*$  — равновесная концентрация вакансий при данной температуре;  $t$  — время диффузии. Тогда концентрация вакансий в момент времени  $t$

$$N_v(x, t) = [N_v(x) \tau_v/t + N_v^*]/(1 + \tau_v/t). \quad (2)$$

Видно, что концентрация вакансий изменяется по гиперболическому закону и для достаточно большого времени отжига становится постоянной и равновесной при данной температуре отжига.

В дальнейшем допускается, что дрейфовая составляющая, обусловленная взаимодействием ионизированных вакансий и примесей, отсутствует. Тогда обобщенное уравнение диффузии

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(x) \frac{\partial N}{\partial x} - v(x) N \right], \quad (3)$$

где первый член в правой стороне — градиентная компонента,  $v(x)N$  — дрейфовая, преобразуется в уравнение с координатно-зависимым коэффициентом диффузии.

Если допустить, что отношение коэффициента стимулированной диффузии  $D(x)$  к равновесному при данной температуре коэффициенту диффузии  $D_r$ , пропорционально локальному увеличению концентрации вакансий, образованных ионной бомбардировкой, то получается следующее выражение для

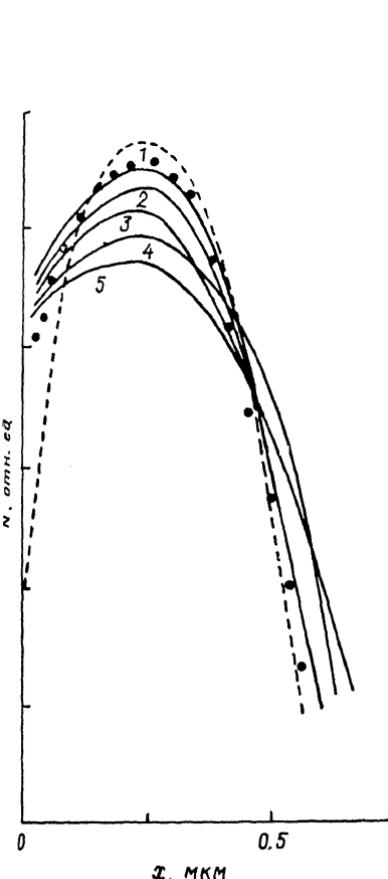


Рис. 1. Расчетные концентрационные профили примеси при различных временах термоотжига.

Время отжига, с: 1 — 0.03, 2 — 0.06, 3 — 0.09, 4 — 2, 5 — 6; точки — эксперимент [4], штриховая линия — по теории Линдхарда, Шарффа и Шиotta [1].

$D(x)$ :  $D(x) = D_r N_v(x, t) / N_v^t$ . Распределение концентраций вакансий  $N_v(x, t)$  находится из решения системы уравнений

$$N_v(x, t) = \frac{N_v(x) \tau_v/t}{1 + \tau_v/t} \frac{N_v^t}{1 + \tau_v/t}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial N_v(x, t)}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 N_v(x, t)}{\partial x^2},$$

описывающих их кинетику отжига, где  $D_v$  — коэффициент диффузии вакансий, стимулирующих диффузию. Из (4) определяется коэффициент

$$D(x) = \frac{D_v}{N_v^t} N_v(x) \frac{\tau_v/t}{1 + \tau_v/t} + D_r \frac{1}{1 + \tau_v/t}, \quad (5)$$

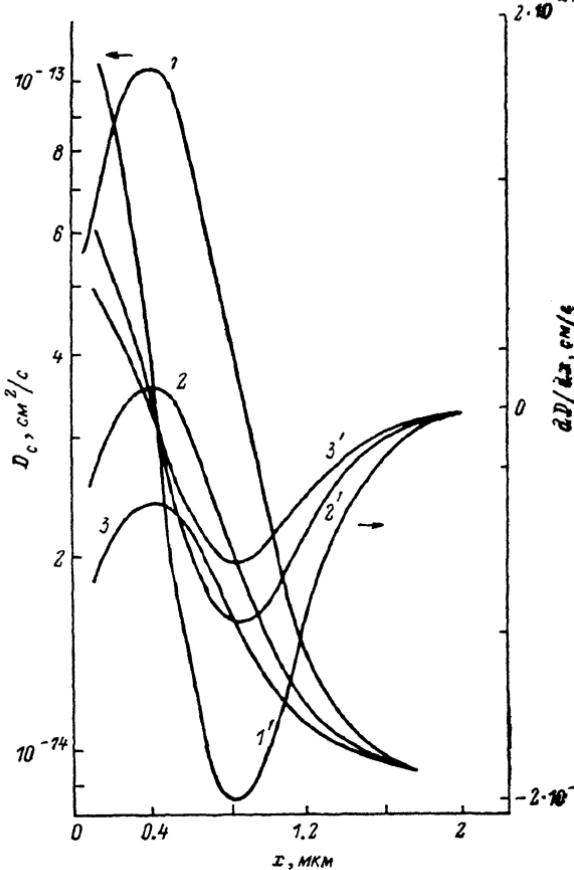


Рис. 2. Изменение коэффициента стимулированной диффузии цинка (1—3) в GaAs, имплантированного ионами аргона.

$E=40$  кэВ,  $\Phi=2 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>. Время отжига, с: 1 — 0.5, 2 — 1.0, 3 — 1.5; 1'—3' — производные коэффициенты диффузии для тех же режимов отжига.

зависящий от концентрации вакансий.  $N_v(x)$  задается функцией Гаусса. Таким образом, эффективный коэффициент диффузии атомов примеси зависит как от времени, так и от положения, а также от температуры (несмотря на то что температура в условие задачи не входит, но закон изменения  $D_t$  от температуры, как правило, известен). Движение вакансий, образованных при отжиге дефектов, вызывает диффузионное перемещение атомов примеси, и можно считать, что РСД будет характеризоваться теми же механизмами, что и отжиг радиационных дефектов. После дифференцирования уравнения (3) и соответствующих преобразований получается дифференциальное уравнение РСД

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \left[ \frac{D_t}{N_v^2} N_v(x) \frac{\tau_v/t}{1 + \tau_v/t} + D_t \frac{1}{1 + \tau_v/t} \right] \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{D_t}{N_v^2} \frac{\tau_v/t}{1 + \tau_v/t} \left( \frac{x - R_p}{\Delta R_p} \right) N_v(x) \frac{\partial N}{\partial x}, \quad (6)$$

где  $R_p$  — проецированный пробег,  $\Delta R_p$  — разброс проецированного пробега. Уравнение (6) решается приближенно численным методом с начальными и граничными условиями, соответствующими диффузии из ограниченного источника. Если длительность эксперимента намного больше времени жизни ВД  $t \gg \tau_v$ , уравнение (6) преобразуется в уравнение второго закона Фика. Когда  $t \leq \tau_v$  или  $t \geq \tau_v$ , уравнение (6) сохраняет сложную зависимость от координаты и времени.

Численные расчеты распределения примеси выполнены для диффузии цинка из ограниченного источника в предварительно облученный GaAs ионами Ar. Для расчета использованы параметры имплантации, приведенные в работе [8]. Среднее время жизни  $\tau_v = 0.08$  с, диффузионная длина  $L_d = -0.1 \div 0.8$  мкм, концентрация равновесных вакансий  $N_v^0 = 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, а  $D_t = 10^{10}$  см<sup>2</sup>/с. При более коротких импульсах отжига профили примеси близки по форме к постимплантационным профилям дефектов. За время отжига не происходит заметной диффузии примеси, тогда как при термическом отжиге наблюдается значительное перераспределение примеси, показанное на рис. 1 точками. Можно предполагать, что при малых временах отжига аннигиляция примеси с вакансиями происходит преимущественно на фиксированных стоках. Отметим хорошее согласие рассчитанных кривых с экспериментальными данными (см. рис. 1 в [9]), а значит, работоспособность модели (6) и правильность сделанных допущений. Отсутствие значительного уширения профилей можно связать с отсутствием градиента температуры в объеме полупроводниковой пластины, что является преимуществом используемого способа отжига [10].

В характере изменения коэффициента РСД (рис. 2) наблюдается гиперболический спад. При увеличении длительности отжига  $D(x)$  стремится к постоянной величине, равной  $D_t$  на любом расстоянии от границы раздела.

#### Список литературы

- [1] Thuchimoto T., Tokuyama T. // Rad. Eff. 1970. V. 6. P. 121—123.
- [2] Болтакс Б. И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. Л., 1972. 384 с.
- [3] Street R. A., Johnson N. M., Burnham R. D. // 33 Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1985. V. 46. P. 333—338.
- [4] Fair R. B., Wortman J. J., Liu J. // J. Electrochem. Soc.: Sol. St. Sci. Techn. 1984. V. 10. P. 2387—2394.
- [5] Блинов Ю. Ф., Серба П. В. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 9. С. 1706—1708.
- [6] Величко О. И., Лабунов В. А. // Микроэлектрон. 1985. Т. 14. В. 6. С. 542—547.
- [7] Зелевинская В. М., Качурин Г. А., Придачин Н. Б. // ФТП. 1974. Т. 8. В. 2. С. 394—396.
- [8] Буренков А. Ф., Комаров Ф. Ф., Кумахов М. А., Темкин М. М. Таблицы параметров пространственного распределения ионноимплантированных примесей. Минск, 1981. 352 с.
- [9] Kohzu H., Kuzuhara M., Takayama Y. // J. Appl. Phys. 1974. V. 54. N 9. P. 4998—5003.
- [10] Шипицяну Ф. С., Синицук И. К., Показной И. И., Чебан В. В., Шонтия В. П. // Тез. докл. XI Всес. конф. по физике полупроводников. Кишинев, 1988. Т. 3. С. 49—50.
- [11] Lindhard J., Scharff M., Schiott H. // Danske. Videnskab. Mat.-fys. Medd. 1963. V. 33. N. 14. P. 1.