

Модель ослабления диффузии, ускоренной окислением, в сильно легированных слоях кремния

© О.В. Александров[¶], Н.Н. Афонин^{*¶}

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,
197376 Санкт-Петербург, Россия

* Воронежский государственный педагогический университет,
394043 Воронеж, Россия

(Получена 24 декабря 2001 г. Принята к печати 3 декабря 2002 г.)

Предложена модель ослабления диффузии, ускоренной окислением, в сильно легированных слоях кремния посредством объемной рекомбинации собственных межузельных атомов на центрах, связанных с легирующей примесью. Учет рекомбинации избыточных собственных межузельных атомов, генерируемых при термическом окислении, позволяет описать зависимость ослабления диффузии, ускоренной окислением, от уровня легирования. Из анализа экспериментальных данных по диффузии, ускоренной окислением примесей В и Р в изоконцентрационно-легированных слоях кремния, определены константы скорости и рекомбинации о оценены радиусы захвата при различных вариантах взаимодействия избыточных собственных межузельных атомов с примесными атомами и парами примесь–вакансия.

1. Введение

Термическое окисление кремния вызывает ускорение диффузии ряда примесей замещения (Р, В, Al, Ga, In), диффундирующих преимущественно по непрямо-му межузельному (interstitialcy) механизму (см. обзоры [1,2]). Одновременно с диффузией, ускоренной окислением (ДУО), наблюдается рост окислительных дефектов упаковки типа внедрения. Оба явления были объяснены Хью [3] генерацией избыточных собственных межузельных атомов (СМА) на межфазной границе (МФГ) Si/SiO₂ при термическом окислении кремния. Для примесей В и Р экспериментально установлено ослабление эффекта ДУО с увеличением уровня легирования кремния выше собственной концентрации носителей заряда при температуре окислительного отжига [4–8].

Мияке [6] полагал, что причиной замедления ДУО бора с увеличением уровня изоконцентрационного легирования фосфором является рекомбинация нейтральных СМА с отрицательно заряженными вакансиями. При этом полагалось, что реакция взаимодействия находится в равновесии и к ней применим закон действующих масс. Далее (в п. 5) нами показано, что в этом случае относительные концентрации избыточных СМА не зависят от уровня легирования и поэтому равновесная рекомбинация не может быть причиной эффекта ослабления ДУО с ростом легирования. Отметим также, что прямая бимолекулярная рекомбинация избыточных СМА со свободными заряженными вакансиями представляется значительно менее вероятной, чем их рекомбинация на центрах, таких как атомы самой легирующей примеси или их комплексы с вакансиями, концентрации которых в сильно легированных слоях кремния значительно превышают концентрации свободных вакансий.

Жилес [9] связал эффект ослабления ДУО с ростом легирования с уменьшением относительного пересыщения по СМА вследствие увеличения равновесных концентраций СМА в заряженных состояниях в соответствии со смещением уровня Ферми. В рамках модели [9] из анализа экспериментальных зависимостей ДУО от уровня легирования авторами работ [7–9] были найдены уровни заряженных СМА в запрещенной зоне кремния, которые значительно отличались друг от друга. Отметим, что в рамках модели [9] не удается удовлетворительным образом объяснить результаты, полученные в работе [8], по влиянию на ДУО слабо легированного слоя, находящегося на поверхности сильно легированного.

В настоящей работе предложена модель ослабления ДУО в сильно легированных слоях кремния посредством рекомбинации генерируемых при термическом окислении избыточных СМА на центрах, связанных с легирующей примесью.

2. Основные положения и уравнения модели

При моделировании ДУО будем полагать, что рассматриваемая примесь замещения диффундирует в решетке кремния по дуальному вакансионно-непрямому межузельному механизму. Коэффициент диффузии в этом случае определяется соотношением [2]

$$D = h_E D^* (f_V a_V + f_I a_I), \quad (1)$$

где h_E — коэффициент ускорения диффузии внутренним электрическим полем; D^* — коэффициент диффузии примеси в равновесных условиях по собственным точечным дефектам (СТД); f_V и f_I — относительные доли диффузии примеси по вакансионному и непрямому межузельному механизмам, соответственно

[¶] E-mail: aleks_ov@mailbox.alkor.ru

^{¶¶} E-mail: nafonin@vspsu.ac.ru

$f_V + f_I = 1$; $a_V = [V]/[V_{\text{eq}}]$ и $a_I = [I]/[I_{\text{eq}}]$ — коэффициенты пересыщения (или недосыщения) по вакансиям и СМА соответственно; $[V_{\text{eq}}]$, $[I_{\text{eq}}]$ и $[V]$, I — равновесные и неравновесные концентрации вакансий и СМА соответственно. При условии локального равновесия в соответствии с законом действующих масс $a_V = 1/a_I$.

МФГ Si/SiO₂ при термическом окислении служит источником неравновесных СМА. Скорость генерации СМА на МФГ со стороны кремния прямо пропорциональна скорости окисления [3]. Генерируемые в процессе окисления неравновесные СМА диффундируют в глубь кремния, ускоряя в соответствии с (1) диффузию примесей замещения, уходят на стоки и рекомбинируют на объемных центрах. В легированном кремнии роль фоновых объемных стоков играют остаточные примеси и дефекты. В легированном кремнии возможен дополнительный уход СМА на центры, связанные с легирующей примесью. В качестве таких центров могут служить заряженные свободные вакансии, атомы легирующей примеси, а также пары (легирующая примесь)–вакансия, захват на которые осуществляется в соответствии с уравнениями



где S — собственный атом кремния в узле, A — атом легирующей примеси, AV — примесно-вакансионная пара.

Уравнения совместной диффузии примеси и СМА имеют вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2 I}{\partial x^2} - (k_{IA} + k_I)(I - I_{\text{eq}}), \quad (4)$$

где x — координата, отсчитываемая от МФГ в глубь кремния, t — текущее время, C — концентрация диффундирующей примеси, D_I — коэффициент диффузии СМА, k_I и k_{IA} — константы скоростей рекомбинации избыточных СМА на фоновых объемных ловушках и на центрах, связанных с легирующей примесью, соответственно.

Граничным условием для СМА на МФГ Si/SiO₂ при $x = 0$ является условие равенства скорости их поверхностной генерации на МФГ со стороны кремния G_I диффузионному потоку в глубь кремния и скорости поверхностной рекомбинации на МФГ [3]:

$$-D_I \frac{\partial I}{\partial x} + \sigma(I - I_{\text{eq}}) = G_I, \quad (5)$$

где σ — скорость поверхностной рекомбинации СМА при термическом окислении,

$$G_I = \alpha \gamma V_{\text{ox}} N_S, \quad (6)$$

где α — отношение толщины окисленного кремния к толщине образовавшегося диоксида W_{ox} ($\alpha = 0.44$);

γ — количество СМА, образующихся на МФГ со стороны кремния при образовании одной молекулы диоксида; V_{ox} — скорость окисления кремния; N_S — концентрация молекул SiO₂ в диоксиде кремния ($N_S = 2.2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$). Полагалось, что в глубине образца концентрация СМА не изменяется и соответствует своему равновесному значению $I = I_{\text{eq}}$ во все время отжига.

Кинетика окисления описывается линейно-параболическим законом Дила–Гроува

$$\frac{W_{\text{ox}}^2}{K_p} + \frac{W_{\text{ox}}}{K_l} = t, \quad V_{\text{ox}} = \frac{K_p}{2W_{\text{ox}} + K_p/K_l},$$

в котором линейная K_l и параболическая K_p константы скорости роста диоксида кремния при высоком уровне легирования являются зависящими от концентрации [10].

Задача о ДУО примесей В и Р решалась для случая изоконцентрационного легирования кремния, соответствующего условиям экспериментов [5–8], в которых глубина окисленного слоя кремния (0.1–0.12 мкм) была существенно меньше области локализации примесных распределений (~1 мкм). Поэтому сегрегационными эффектами при моделировании пренебрегали и решали задачу для уравнений (4), (5) со стационарной МФГ SiO₂/Si, которая для диффундирующих атомов примеси полагалась отражающей, т. е.

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad \text{при} \quad x = 0. \quad (7)$$

3. Параметры модели

При высоких уровнях изоконцентрационного легирования, используемых в экспериментах [5–8], внутреннее электрическое поле в диффузионных слоях отсутствует, т. е. $h_E \simeq 1$ в соотношении (1). Коэффициенты диффузии примесей В и Р в равновесных условиях по СТД являются зависящими от концентрации [11]:

$$D_B^* = D_B^0 + D_B^+ p/n_i, \quad (8)$$

$$D_P^* = D_P^0 + D_P^- n/n_i + D_P^{2-} (n/n_i)^2, \quad (9)$$

где D_B^r и D_P^r — парциальные собственные коэффициенты диффузии бора и фосфора, соответственно, посредством собственных точечных дефектов с зарядом r ($r = 0, \pm 1$ и -2), p — концентрация дырок, n — концентрация электронов, n_i — собственная концентрация носителей заряда. При изоконцентрационном легировании донорной примесью с концентрацией C_D ($C_D \gg C_B, C_P$) имеем

$$n = \frac{1}{2} \left(C_D + \sqrt{C_D^2 + 4n_i^2} \right), \quad p = n_i^2/n.$$

При изоконцентрационном легировании акцепторной примесью с концентрацией C_A ($C_A \gg C_B, C_P$)

$$p = \frac{1}{2} \left(C_A + \sqrt{C_A^2 + 4n_i^2} \right), \quad n = n_i^2/p.$$

Относительная доля диффузии бора и фосфора по непрямому межузельному механизму, согласно последним данным [2,12], составляет $f_I \simeq 0.9$.

Коэффициент диффузии СМА, который в литературе имеет большой разброс (от 10^{-10} до $3 \cdot 10^{-6}$ см²/с при температуре отжига $T_{\text{анн}} = 1000^\circ\text{C}$), взят по данным работы [13]:

$$D_I = 0.335 \exp(-1.86/kT),$$

а равновесная концентрация СМА — по данным работы [14]:

$$I_{\text{eq}} = 4.76 \cdot 10^{25} \exp(-3.02/kT).$$

Константа скорости рекомбинации избыточных СМА в нелегированном кремнии определяется диффузионной длиной СМА L_I : $k_I = D_I/L_I^2$. Длина L_I в свою очередь определяется концентрацией остаточных примесей и дефектов в объеме нелегированного кремния. Мы полагаем $L_I \simeq 1$ мкм. Скорость поверхностной рекомбинации СМА полагалась равной $\sigma = 1.0 \cdot 10^{-6}$ см/с [15]. Величина параметра γ в выражении (6) для скорости поверхностной генерации определена равной $\gamma = 4 \cdot 10^{-3}$ и не зависит ни от температуры окислительного отжига, ни от типа легирующей примеси. Отметим, что найденное значение γ лежит в диапазоне литературных значений от ~ 0.001 [3] до ~ 0.02 [16].

Константа скорости рекомбинации избыточных СМА на центрах, связанных с легирующей примесью k_{IA} , зависит от зарядового состояния СМА и центра. Анализировались различные возможные варианты концентрационной зависимости константы скорости рекомбинации СМА в виде

$$k_{IA} = K_m^m C_A P^{m-1}$$

для акцепторной легирующей примеси или

$$k_{IA} = K_m^m C_D n^{m-1}$$

для донорной легирующей примеси, где $m = 1-3$.

4. Результаты моделирования

Краевая задача для уравнений (3), (4) с коэффициентами диффузии примеси (1), (8), (9) и граничными условиями для СМА и примеси (5)–(7) решалась численно методом конечных разностей с использованием неявных разностных схем [17]. В качестве начальных условий для примеси использовались ее экспериментальные распределения после ионной имплантации и предварительного активирующего отжига. С целью определения вида концентрационной зависимости k_{IA} и значений параметров модели проводился анализ экспериментальных

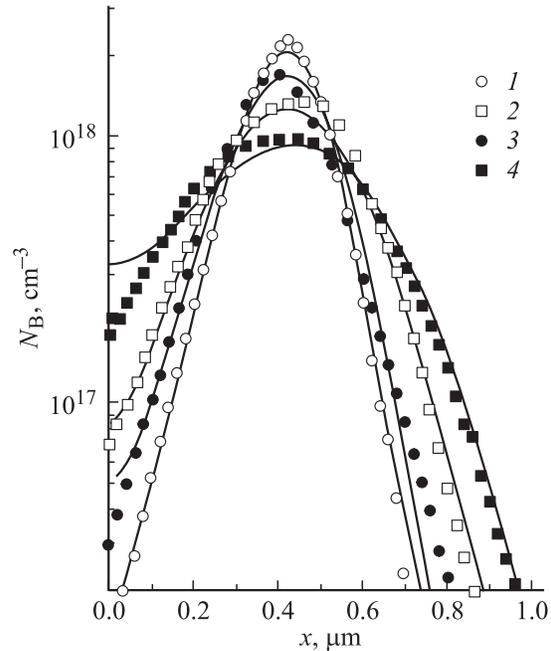


Рис. 1. Распределения концентрации бора N_B в кремнии после отжига (1000°C , 30 мин) в среде азота (1,2) и сухого кислорода (3,4) при уровне изоконцентрационного легирования фосфором, см⁻³: 1,3 — $2 \cdot 10^{14}$; 2,4 — $7.4 \cdot 10^{19}$; сплошные линии — расчет при $K_2 = 4 \cdot 10^{-20}$ см³/с^{1/2}, точки — эксперимент [6].

данных [5–8] по ДУО примесей В и Р в слоях кремния, изоконцентрационно-легированных примесями В, Р и As.

На рис. 1 показаны экспериментальные [6] и расчетные распределения бора по глубине кремния после отжига в азоте и в сухом кислороде (1000°C , 30 мин) при разных уровнях изоконцентрационного легирования фосфором. При расчете полагалось, что при отжиге в среде азота (кривые 1,2) скорость генерации СМА $G_I = 0$, концентрация СМА $I = I_{\text{eq}}$. В этом случае перераспределение примеси определяется в соответствии с зависимостью коэффициента диффузии бора от концентрации (8) в условиях равновесия по СТД. Отметим, что зависимость вида (8) позволяет достаточно хорошо описать форму экспериментальных кривых распределения бора и учесть уменьшение диффузионного уширения исходного распределения с увеличением уровня изоконцентрационного легирования фосфором. При отжиге в среде кислорода (кривые 3,4) скорость генерации избыточных СМА $G_I \neq 0$, концентрация СМА на поверхности кремния $I_S > I_{\text{eq}}$, что приводит к большему диффузионному уширению распределений бора, чем при отжиге в азоте. Расчет соответствует квадратичной концентрационной зависимости константы скорости рекомбинации СМА ($m = 2$).

На рис. 2 построены расчетные распределения концентрации СМА по глубине кремния, соответствующие диффузии бора в условиях окислительного отжига [6] (1000°C , 30 мин) при различных уровнях изоконцентра-

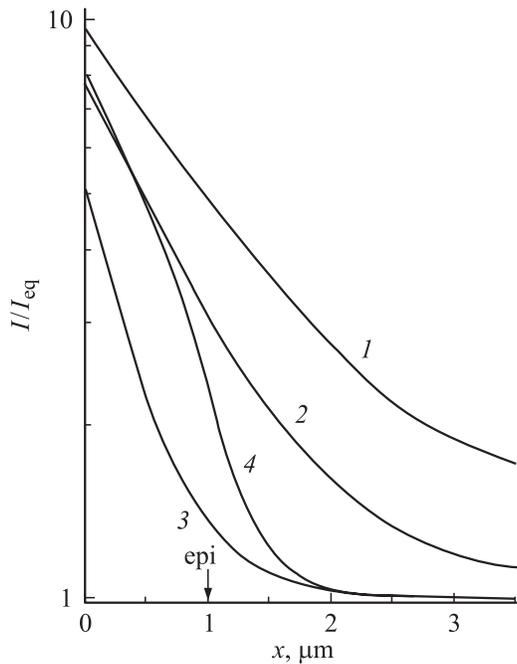


Рис. 2. Расчетные распределения СМА по глубине кремния при отжиге в сухом кислороде (1000°C) и уровне изоконцентрационного легирования фосфором $C_P, \text{см}^{-3}$: 1 — $2 \cdot 10^{14}$, 2 — $2.7 \cdot 10^{19}$, 3 — $7.4 \cdot 10^{20}$. Для кривой 4 $C_P = 2 \cdot 10^{14}$ в эпитаксиальном слое толщиной 1 мкм и $7.4 \cdot 10^{20}$ в подложке. Расчет выполнен при $K_2 = 4 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/2}$.

ционного легирования кремния фосфором (кривые 1–3). Здесь же приведено расчетное распределение концентрации СМА по глубине системы, состоящей из слабо легированного эпитаксиального слоя, находящегося на поверхности сильно легированной кремниевой подложки (кривая 4). Как видно из рис. 2, с увеличением уровня изоконцентрационного легирования наблюдается уменьшение поверхностной концентрации СМА. Присутствие слабо легированного слоя на поверхности сильно легированной подложки приводит к увеличению поверхностной концентрации СМА (ср. кривые 3 и 4). И наоборот, наличие сильно легированной подложки под слабо легированным эпитаксиальным слоем уменьшает поверхностную концентрацию СМА (ср. кривые 1 и 4).

Как видно из рис. 1 и 2, область характерного изменения концентрации СМА в сильно легированных слоях сравнима с областью локализации примесных распределений ($< 1 \mu\text{м}$). Поэтому при моделировании рассчитывалось усредненное значение коэффициента диффузии примеси при отжиге в среде $\langle D_{\text{O}_2} \rangle$ по глубине области решения. Затем анализировалось поведение его отношения к коэффициенту диффузии при отжиге в инертной среде $\langle D_{\text{O}_2} \rangle / D_{\text{N}_2}$ при изменении концентрации легирующей примеси. На рис. 3 приведены расчетные зависимости относительного коэффициента диффузии бора, соответствующие различным вариантам концентрационной зависимости скорости рекомбинации

СМА при отжиге в среде кислорода ($T_{\text{ann}} = 1000^\circ\text{C}$, 30 мин) в сравнении с экспериментальными результатами, полученными в работах [5] и [8]. Спадающий в обе стороны от значения $p/n_i = 1$ вид зависимо-

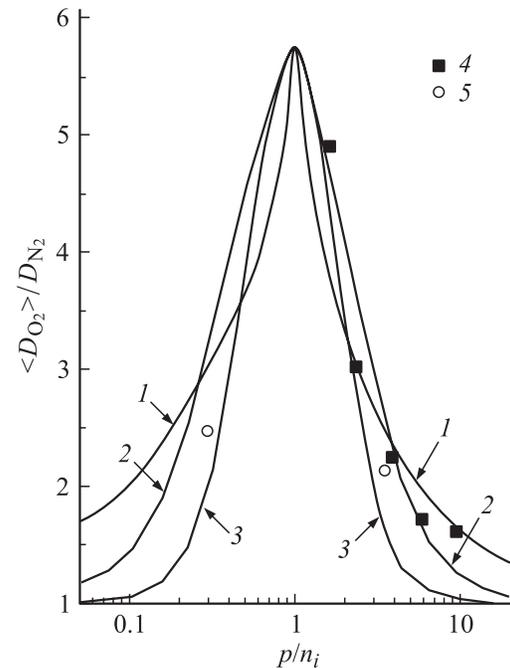


Рис. 3. Зависимости относительного коэффициента диффузии бора от концентрации образцов в сухом кислороде (1000°C). Кривые — расчет при значениях m : 1 — 1, 2 — 2, 3 — 3; точки — эксперимент: 4 — [5], 5 — [8].

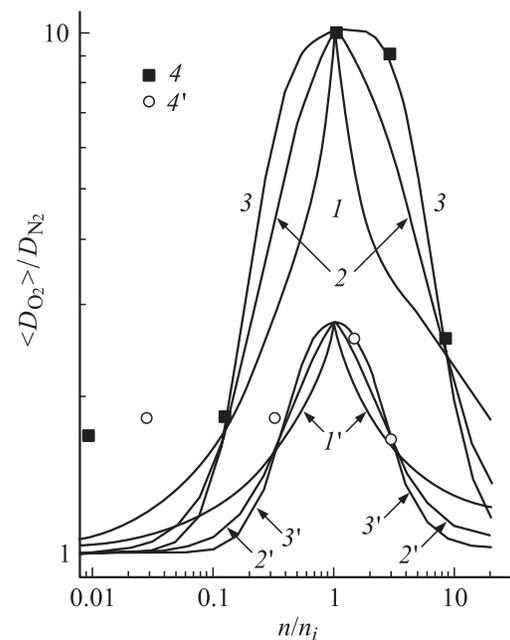


Рис. 4. Зависимости относительного коэффициента диффузии фосфора от концентрации при отжиге образцов в сухом кислороде при температуре $T_{\text{ann}}, ^\circ\text{C}$: 1–4 — 900 , 1'–4' — 1100 . Сплошные линии — расчет при значениях m : 1, 1' — 1; 2, 2' — 2; 3, 3' — 3; точки 4, 4' — эксперимент [7].

стей $\langle D_{O_2} \rangle / D_{N_2}$ соответствует уменьшению относительной концентрации СМА с ростом уровня легирования вследствие увеличения интенсивности их захвата на центры, связанные с легирующей примесью. При моделировании мы добивались наилучшего согласия расчета и экспериментальных данных для каждого варианта концентрационной зависимости скорости рекомбинации. Этому соответствовали следующие значения параметров: $K_1 = 7.5 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}$, $K_2 = 4 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/2}$, $K_3 = 5 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/3}$ при $T_{\text{ann}} = 1000^\circ\text{С}$.

На рис. 4 приведены результаты моделирования концентрационной зависимости относительного коэффициента диффузии фосфора при отжиге образцов в кислороде при температурах 900 и 1100°C в сравнении с экспериментальными результатами, полученными в работе [7]. Расчетные кривые получены при следующих значениях параметров: $K_1 = 5 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}$, $K_2 = 3.2 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/2}$, $K_3 = 2.8 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/3}$ при $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{С}$ и $K_1 = 2.5 \cdot 10^{-19} \text{ см}^3/\text{с}$, $K_2 = 6 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/2}$, $K_3 = 4 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/3}$ при $T_{\text{ann}} = 1100^\circ\text{С}$.

5. Обсуждение результатов

В соответствии с положениями модели, при увеличении уровня изоконцентрационного легирования увеличивается интенсивность рекомбинации избыточных СМА на центрах, связанных с легирующей примесью. Это приводит к уменьшению относительной концентрации избыточных СМА, их вклада в процесс диффузионного переноса примеси и, таким образом, к ослаблению эффекта ДУО. В соответствии с уравнением (4) ослабление ДУО определяется увеличением константы скорости рекомбинации k_{IA} , определяемой концентрацией примеси. При используемых в [6–8] уровнях изоконцентрационного легирования характеристическая постоянная времени установления стационарного состояния определяется временем жизни СМА

$$\tau_I = (k_{IA} + k_I)^{-1}$$

и составляет единицы или доли секунды. При временах отжига $\tau \gg \tau_I$ и постоянных D_I , k_{IA} и G_I уравнение (4) имеет стационарное аналитическое решение [18]:

$$I(x) = (I_S - I_{\text{eq}}) \exp\left(-x/\sqrt{D_I \tau_I}\right) + I_{\text{eq}}, \quad (10)$$

$$I_S = G_I / \sqrt{D_I / \tau_I}, \quad (10a)$$

где I_S — поверхностная концентрация СМА. Отметим, что в нашем случае скорость окисления кремния падает с увеличением времени, G_I не является постоянной, и поэтому аналитическое решение (10) является приближенным. Из (10) видно, что рекомбинация оказывает влияние не только на скорость падения концентрации

избыточных СМА с глубиной, но и на величину поверхностной концентрации СМА

$$I_S \propto 1/\sqrt{(k_{IA} + k_I)}.$$

Именно падение поверхностной концентрации СМА с увеличением скорости рекомбинации является основной причиной ослабления ДУО с увеличением уровня легирования.

Увеличение скорости рекомбинации СМА с увеличением уровня легирования может быть обусловлено захватом избыточных СМА на заряженные вакансии, ионизованные атомы примеси (с последующим захватом вакансии), а также на их комплексы с вакансиями в соответствии с реакциями (2a)–(2в). Реакцию (2a) — непосредственной бимолекулярной рекомбинации СМА с вакансией — мы полагаем менее вероятной, чем реакции (2б) и (2в), поскольку концентрация легирующей примеси, а также ее комплексов с вакансиями при высоких уровнях легирования много больше, чем свободных заряженных вакансий. Линейная концентрационная зависимость k_{IA} ($m = 1$) может реализоваться при захвате нейтральных СМА на атомы ионизованной примеси ($k_{IA} \propto C_D^-$ или $k_{IA} \propto C_A^+$). Квадратичную зависимость k_{IA} ($m = 2$) можно ожидать при захвате нейтральных СМА на пары ионизованной примеси с противоположно заряженной вакансией, а также при захвате заряженных СМА на противоположно заряженные атомы примеси ($k_{IA} \propto nC_D^-$ или $k_{IA} \propto pC_A^+$). Кубическая зависимость k_{IA} ($m = 3$) может иметь место при захвате заряженных СМА на пары ионизованной примеси с противоположно заряженной вакансией ($k_{IA} \propto n^2C_D^-$ или $k_{IA} \propto p^2C_A^+$). Как видно из рис. 3, 4, каждая из этих трех вариантов концентрационных зависимостей способна описать спадающий от значения $p/n_i = 1$ (или $n/n_i = 1$) характер относительных коэффициентов ДУО. Для диффузии бора (рис. 3) более предпочтительным, на наш взгляд, являются зависимости с $m = 1–2$, а для диффузии фосфора (рис. 4) — с $m = 2–3$. Для более точного определения показателя концентрационной зависимости, по-видимому, недостаточно экспериментальных точек.

В случае диффузионно-лимитированного захвата нейтральных СМА на ионизованные атомы легирующей примеси

$$k_{IA} = 4\pi R D_I C,$$

где R — радиус захвата СМА, откуда имеем

$$K_1 = 4\pi R D_I.$$

Из найденных значений K_1 находим оценку радиуса для этого варианта захвата $R_1 \simeq (4–12) \cdot 10^{-4}$ нм.

В случае захвата заряженных СМА на ионизованные атомы легирующей примеси имеем (для донорного легирования)

$$k_{IA} = 4\pi R D_I C_D^+ n/n_I,$$

где n_I — концентрация электронов, соответствующая уровню Ферми, совпадающему с уровнем заряжен-

ных СМА, в результате

$$K_2^2 = 4\pi R D_I / n_I.$$

Полагая, что этот уровень лежит вблизи середины запрещенной зоны ($n_I \simeq n_i$), получаем оценку $R_2 \simeq (1.0-1.4) \cdot 10^{-4}$ нм.

В случае захвата нейтральных СМА на пары ионизованной примеси с противоположно заряженной вакансией имеем (для донорного легирования)

$$k_{IA} = 4\pi R D_I k_E C_D^+ V^0 n / n_V,$$

где n_V — концентрация электронов, соответствующая уровню Ферми, совпадающему с уровнем заряженной вакансии, V^0 — концентрация нейтральных вакансий, k_E — константа реакции образования пар:

$$k_E = (4/5) \cdot 10^{22} \exp(E_B/kT),$$

E_B — энергия связи пары, в результате имеем

$$K_2^2 = 4\pi R D_I k_E V^0 / n_I.$$

При $n_V \simeq n_i$, $E_B \simeq 1.5$ эВ и концентрации V^0 , принятой по данным [19], получаем оценку $R_{2E} \simeq 0.02-0.65$ нм.

Для случая захвата заряженных СМА на пары ионизованной примеси с противоположно заряженной вакансией имеем (для донорного легирования)

$$k_{IA} = 4\pi R D_I k_E C_D^+ V^0 n^2 / (n_V n_I),$$

в результате

$$K_3^3 = 4\pi R D_I k_E V^0 / (n_V n_I)$$

и для радиуса взаимодействия получаем оценку $R_{3E} \simeq 0.01-0.08$ нм.

Значения R_1 и R_2 являются физически нереально малыми, т.е. наиболее вероятными центрами захвата нейтральных и(или) заряженных СМА являются примесно-вакансионные пары с радиусами R_{2E} и R_{3E} соответственно.

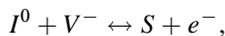
Мияке [6] объяснял уменьшение ДУО бора с увеличением уровня легирования фосфором рекомбинацией избыточных СМА на акцепторных вакансиях V^- . Автор пришел к этому выводу, используя закон действующих масс в виде

$$\Delta I V^- = \Delta I_i V_i^-,$$

где нижний индекс означает „собственные“ условия легирования ($C \ll n_i$), откуда было получено

$$\Delta I / \Delta I_i = V_i^- / V^- = n_i / n.$$

Однако для реакции нейтральных СМА с акцепторной вакансией



где e^- — электрон, закон действующих масс имеет вид

$$I^0 V^- / n = I_i^0 V_i^- / n_i = \text{const},$$

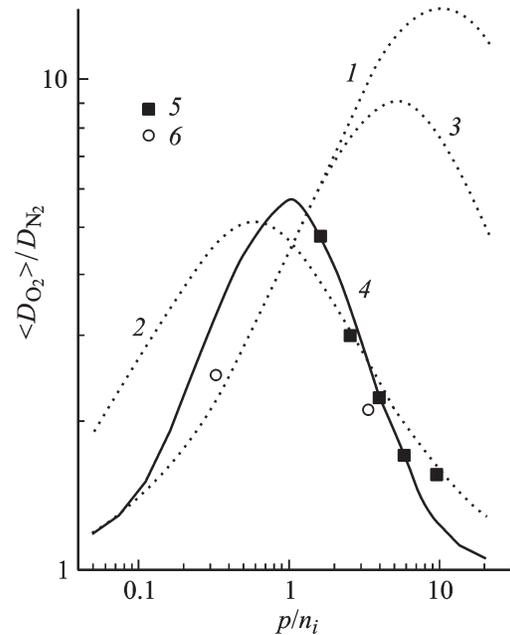


Рис. 5. Зависимости относительного коэффициента диффузии бора от концентрации при отжиге образцов в сухом кислороде (1000°C), рассчитанные по модели [9] с уровнями заряженных СМА: 1 — $E_C - 0.11$ эВ, $E_V + 0.17$ эВ [7], 2 — $E_C - 0.35$ эВ, $E_V + 0.50$ эВ [8], 3 — $E_C - 0.09$ эВ, $E_V + 0.34$ эВ [9]. Кривая 4 — расчет по предлагаемой модели (при $K_2 = 4 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}^{1/2}$); точки — эксперимент: 5 — [5], 6 — [8].

откуда

$$I^0 / I_i^0 = (n V_i^-) / (n_i V^-) = 1.$$

Аналогичные соотношения нетрудно получить и для любых других зарядовых состояний рекомбинирующих СМА и вакансий. А именно, при выполнении условия локального равновесия относительное пересыщение по СМА не зависит от уровня легирования, и, следовательно, равновесная рекомбинация не может являться причиной ослабления ДУО с увеличением уровня легирования.

Жилес [9] объяснял эффект ослабления ДУО с ростом легирования уменьшением относительного пересыщения по СМА вследствие увеличения равновесных концентраций СМА в заряженных состояниях в соответствии со смещением уровня Ферми. В рамках этой модели из анализа экспериментальных зависимостей ДУО от уровня легирования авторами [7–9] были найдены уровни заряженных СМА в запрещенной зоне. На рис. 5 нами построены зависимости относительного коэффициента диффузии бора от уровня легирования, рассчитанные по модели [9] для уровней, найденных в работах [7–9]. Как видно из рисунка, уровни СМА, найденные в [8], позволяют описать диффузию бора только при акцепторном изоконцентрационном легировании, а уровни СМА, найденные в [7,9], — только при донорном. Отметим также, что в рамках модели [9] не удается

удовлетворительным образом объяснить результаты работы [8] по влиянию на ДУО слабо легированного слоя, находящегося на поверхности сильно легированного. При наличии слабо легированного эпитаксиального слоя ДУО фосфора увеличивалась в 2–3 раза, несмотря на то что место генерации избыточных СМА — МФГ Si/SiO₂ — отодвигалось от легированного слоя на толщину эпитаксиального слоя (1 мкм). Этот результат связывался авторами работы [8] с двумя возможными причинами:

1) с уменьшением скорости генерации СМА на МФГ Si/SiO₂ при термическом окислении сильно легированных слоев;

2) с появлением внутреннего электрического поля, обусловленного градиентом концентрации примеси в скрытом легированном слое при выращивании на нем эпитаксиального слоя, и его влиянием на увеличение потока СМА от МФГ.

Отметим, однако, что скорость окисления V_{ox} возрастает с увеличением уровня легирования кремния [10] и поэтому можно ожидать скорее увеличения $G_I \propto V_{ox}$, чем его уменьшения. Избыточные СМА в слабо легированном эпитаксиальном слое преимущественно не заряжены, поэтому трудно ожидать заметного влияния внутреннего электрического поля, локализованного вблизи границы (эпитаксиальный слой)–(легированный слой), на поток избыточных СМА от МФГ в глубь кремния.

В рамках настоящей модели увеличение ДУО при наличии на поверхности эпитаксиального слоя находит естественное объяснение. Оно связано с малой концентрацией рекомбинационных центров в слабо легированном эпитаксиальном слое и увеличением по этой причине поверхностной концентрации избыточных СМА в соответствии с выражением (10а), где $I_S \propto \sqrt{\tau_1}$. Этот результат проиллюстрирован на рис. 2, из которого видно, что поверхностная концентрация СМА в образце со слабо легированным эпитаксиальным слоем на сильно легированной подложке (кривая 4) существенно выше, чем в образце в том же уровне легирования подложки (кривая 3). При этом она меньше, чем в образце с низким уровнем легирования (кривая 1), что связано с оттоком СМА от поверхности эпитаксиального слоя в сильно легированную подложку, где высока скорость рекомбинации.

6. Заключение

Таким образом, предложена модель ослабления ДУО в сильно легированных слоях кремния, в которой причиной уменьшения ДУО полагается объемная рекомбинация избыточных СМА на центрах, связанных с легирующей примесью. Показано, что увеличение скорости рекомбинации с ростом уровня легирования приводит к уменьшению поверхностной концентрации избыточных СМА, генерируемых на МФГ SiO₂/Si при термическом

окислении кремния. Из сравнения расчетных концентрационных распределений и зависимостей относительного коэффициента ДУО $\langle D_{O_2} \rangle / D_{N_2}$ для примесей бора и фосфора с экспериментальными данными (при донорном и акцепторном изоконцентрационном легировании) определены константы скорости рекомбинации избыточных СМА. Оценки радиусов взаимодействия показывают, что наиболее вероятными центрами захвата СМА являются пары легирующей примеси с вакансиями. Проведено обсуждение других моделей ослабления ДУО и дано объяснение влияния на ДУО слабо легированного слоя, расположенного на поверхности сильно легированного.

Список литературы

- [1] R.B. Fair. J. Electrochem. Soc., **128**, 1360 (1981).
- [2] P.M. Fahey, P.B. Griffin, J.D. Plummer. Rev. Mod. Phys., **61**, 289 (1989).
- [3] S.M. Hu. J. Appl. Phys., **45**, 1567 (1974); J. Appl. Phys., **57**, 1069 (1985).
- [4] K. Taniguchi, K. Kurosawa, M. Kashiwagi. J. Electrochem. Soc., **127**, 2243 (1980).
- [5] M. Miyake. J. Appl. Phys., **57**, 1861 (1985).
- [6] M. Miyake. J. Appl. Phys., **58**, 711 (1985).
- [7] J.P. John, M. Law. J. Electrochem. Soc., **140**, 1489 (1993).
- [8] D.J. Roth, J.D. Plummer. J. Electrochem. Soc., **141**, 1074 (1994).
- [9] M.D. Giles. IEEE Trans. Comp. Aided Desing, **8**, 460 (1989).
- [10] МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов (М., Радио и связь, 1988) с. 209. [Пер. с англ.: Process and Device Simulation for MOS-VLSI Circuits, ed. by P. Antognetti, D. Antoniadis, R.W. Dutton and W.G. Oldham (Martinus Nijhoff Publishers, 1983)].
- [11] C.P. Ho, S.E. Plummer, R.W. Dutton. IEEE Trans. Electron. Dev., **30**, 1438 (1983).
- [12] A. Ural, P.B. Griffin, J.D. Plummer. Appl. Phys. Lett., **73**, 1706 (1998).
- [13] W. Wijaranakula. J. Appl. Phys., **67**, 7624 (1990).
- [14] A. Leroy. J. Appl. Phys., **50**, 7996 (1979).
- [15] E. Rorris, R.R. O'Brien, F.F. Morehead, R.F. Lever, J.P. Peng, G.R. Srinivasan. IEEE Trans. Comp. Aided Desing, **9**, 1113 (1990).
- [16] S.W. Crowder, C.J. Hsieh, P.B. Griffin, J.D. Plummer. J. Appl. Phys., **76**, 2756 (1994).
- [17] А.А. Самарский. Теория разностных схем (М., Наука, 1983) гл. 3, с. 141.
- [18] Р.Ш. Малкович. Математика диффузии в полупроводниках (СПб., Наука, 1999) с. 134.
- [19] B.J. Masters, E.F. Gorey. J. Appl. Phys., **49**, 2717 (1978).

Редактор Т.А. Полянская

Oxidation enhanced diffusion drop model in silicon heavily doped layers

*O.V. Aleksandrov, N.N. Afonin**

St. Petersburg State Electrotechnical University,
197376 St. Petersburg, Russia

* Voronezh State Pedagogical University,
393043 Voronezh, Russia

Abstract A model has been developed explaining the drop of the oxidation enhanced diffusion (OED) in silicon heavily doped layers by occurrence of self interstitial atom (SIA) recombination on the centers connected with dopant impurities. Account of excess SIA recombination, generated at the thermal oxidation, allows us to describe the OED dependence on the doping level.