

УДК 519.2:541.1

ОСОБЫЙ РЕЖИМ ЛЕГИРОВАНИЯ НАНОКОЛОНН ПОДЛОЖКИ КРЕМНИЯ

Г. А. Тарнавский¹

Проводится компьютерное моделирование ионной имплантации примесей в нанокolonны поверхности кремниевой пластины при направлении потока ионов, параллельном основанию пластины.

Ключевые слова: математическое моделирование, легирование кремния, имплантация, донорные и акцепторные примеси.

1. Введение. Легирование (допинг) — процесс внедрения в кремниевую пластину примесей донорного и/или акцепторного типа (фосфора, мышьяка, сурьмы, бора, галлия, индия и т.п.) для создания в полупроводнике зон повышенной проводимости n- и p-типа. Легирование является одним из важных технологических процессов производства современных наноматериалов и наноустройств. Использование компьютерного моделирования в нанотехнологиях критически необходимо, поскольку экспериментальные исследования в этой области крайне дорогостоящи и требуют, как правило, длительного времени.

Настоящая статья представляет собой продолжение компьютерных исследований, рассмотренных в [1, 2]. Ее главная цель состоит в изучении процесса легирования нанокolonн сложного рельефа поверхности пластины кремния в особо сложном (для практической реализации) режиме технологического процесса — при тангенциальном (параллельном основанию кремниевой пластины) направлении потока ионов имплантанта.

2. Формулировка задачи. Цель исследований. Одними из определяющих параметров технологического процесса легирования являются прицельный угол α_I и энергия E_I имплантации, тип имплантанта S_I и его доза D_I , а также нанорельеф поверхности легируемой пластины кремния.

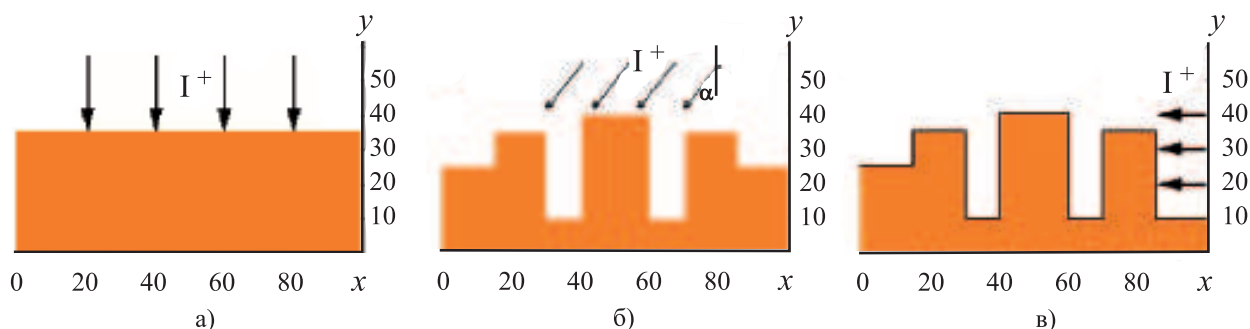


Рис. 1. Схема процесса и нанорельеф поверхности пластины кремния: а) планарная поверхность, угол имплантации $\alpha_I = 0^\circ$; б) сложный нанорельеф, вариация α_I ; в) легирование нанокolonн, $\alpha_I = 90^\circ$

В работе [1] проводилось компьютерное моделирование имплантации P, B и As под нулевым углом α_I , отсчитываемым от вертикальных координатных линий $x = \text{const}$ в пластину Si с планарной поверхностью (рис. 1а). Определялись положение и конфигурация распределений концентраций $C_P(x, y)$, $C_B(x, y)$, $C_{As}(x, y)$ и их зависимость от E_I и D_I .

В работе [2] проводилось моделирование имплантации P, B и As в пластину Si с непланарной поверхностью при вариации α_I до значений 60° (рис. 1б). Исследовалось влияние параметров α_I , E_I и D_I на положение и конфигурацию доменов примесей, изучались эффекты затенения одних структур нанорельефа другими.

В настоящей статье, являющейся продолжением нашего цикла исследований, проводится компьютерное моделирование процесса имплантации P, B и As в Si при значении $\alpha_I = 90^\circ$, т.е. при направлении

¹ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; ведущий науч. сотр., e-mail: gennady.tarnavsky@gmail.com

движения потока ионов параллельно нижней поверхности пластины со сложным нанорельефом ее верхней поверхности (рис. 1в). Этот нанорельеф включает в себя три вертикальных наноколонны (две прямоугольные и одну ступенчатую). Центральная наноколонна толщиной 20 нм и высотой 30 нм немного выше правой колонны (ее высота 25 нм, толщина 15 нм), вследствие чего верхняя часть центральной наноколонны не затеняется правой наноколонной и всегда экспонируется в процессе имплантации потоком ионов,двигающихся влево от правого края расчетной области.

План исследований состоит в вариации значений E_I от 1 до 40 эВ для каждого из имплантируемого субстрата $S_I = (P, B, As)$. Доза имплантанта является фиксированной для всех расчетов и имеет значение $D_I = 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Цель исследований заключается в анализе влияния E_I на глубину проникновения имплантанта последовательно в правую, затем в центральную и далее в левую наноколонны рельефа. Такой анализ особенно важен для использования в реальных сегментах технологического процесса легирования вертикальных участков сложного нанорельефа поверхности при необходимости минимизации внедрения примесей в дно кремниевой подложки для получения требуемых электрофизических свойств пластины.

Инструментом исследований является программный комплекс NanoMod [3], входящий в состав Центра компьютерного моделирования [4], предназначенного для решения научных и прикладных задач в режиме дистанционного доступа.

3. Результаты компьютерного моделирования. Был проведен спектр вычислительных экспериментов по изучению процесса легирования кремниевой пластины бором, фосфором и мышьяком. Бор, как элемент III группы Периодической системы, является акцептором при легировании кремния (элемента IV группы). В зонах имплантации B в Si возникают области дырочной проводимости (электропроводность p-типа). Фосфор и мышьяк, как элементы V группы, являются для кремния донорными примесями. В зонах имплантации P и/или As в Si возникают области электронной проводимости (электропроводность n-типа).

В связи с этим легирование фосфором и/или бором может обеспечить создание в кремниевой пластине каналов проводимости n- и/или p-типа.

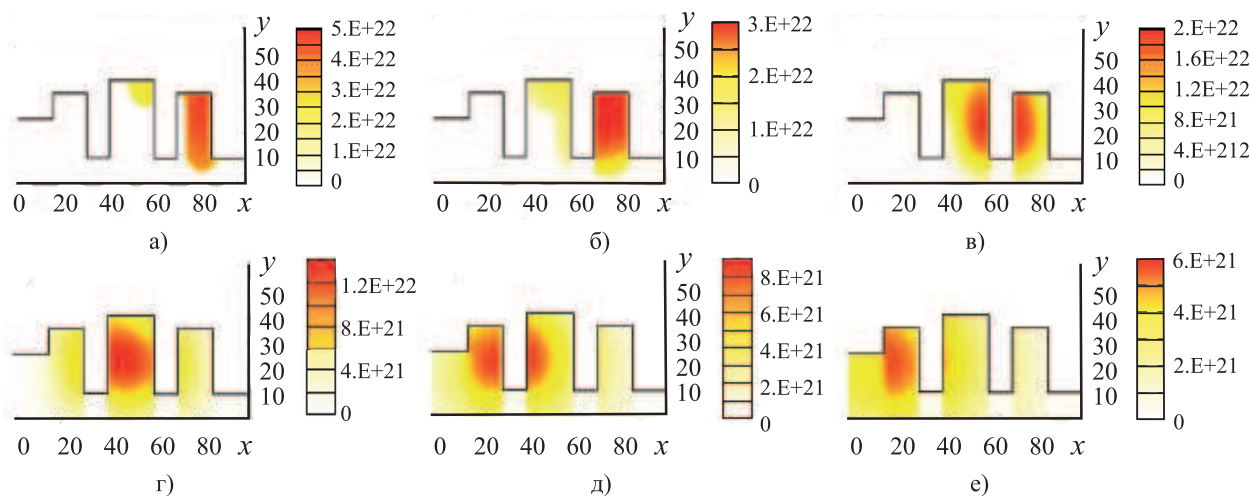


Рис. 2. Имплантация фосфора P в подложку кремния Si. Распределения концентраций P в Si при вариации энергии имплантации а) 1 эВ, б) 5 эВ, в) 10 эВ, г) 20 эВ, д) 30 эВ и е) 40 эВ

Имплантация фосфора. На рис. 2 представлены результаты цикла исследований легирования фосфором при вариации энергии имплантации E_I от 1 до 40 эВ (здесь и ниже доза имплантанта $D_I = 10^{15} \text{ см}^{-3}$). Рассмотрим изменение картины распределения $C_P(x, y)$ последовательно при увеличении E_I .

При минимальном (в данной серии вычислительных экспериментов) значении $E_I = 1$ эВ (рис. 2а) фосфор имплантируется только в правую наноколонну, и при этом P не достигает его левого края. Естественно, наноколонна легирована достаточно равномерно, и C_P почти не зависит от y , хотя процесс диффузии при данных условиях (давление 0.1 МПа, температура 20°C) слабо выносит часть P ниже дна наноколонны, в базовую подложку. Концентрация здесь достигает значений $5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Отметим, что верх центральной наноколонны экспонирован достаточно заметно, и C_P в этой зоне приближается к значениям порядка $4 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$. При $E_I = 5$ эВ (рис. 2б) правая наноколонна полностью легирована на всю свою толщину 15 нм. Часть имплантанта пробивает правую наноколонну, выходит из нее (с потерей энергии) в свободное пространство и слабо, но достаточно заметно экспонирует центральную наноколон-

ну. При $E_I = 10$ эВ (рис. 2в) центральная наноколонна существенно легирована уже на половину своей толщины, при этом в правой наноколонне уровень легирования существенно ослабевает и имеет место только в ее теневой, левой части. Правая, экспонированная сторона этой наноколонны при таком E_I становится для ионов Р “оптически прозрачной”, и значение C_P здесь уменьшается почти до фоновых значений 10^{12} см $^{-3}$. При дальнейшем увеличении E_I до 20 эВ (рис. 2г) центральная наноколонна максимально легирована ($C_P \approx 1.2 \times 10^{22}$ см $^{-3}$). Уровень легирования правой наноколонны заметно падает по всей ее толщине ($C_P \approx 5 \times 10^{21}$ см $^{-3}$), зато начинает существенно легироваться уже левая наноколонна, с примерно такими же (до 6×10^{21} см $^{-3}$) значениями концентрации Р в своей правой части. При $E_I = 30$ эВ (рис. 2д) этот процесс продолжается. Уже и в центральной наноколонне уровень легирования заметно падает, особенно в ее правой части, а в левой наноколонне заметно растет. Здесь концентрация достигает значений 8×10^{21} см $^{-3}$. При максимальном (в данной серии расчетов) значении $E_I = 40$ эВ (рис. 2е) почти вся доза имплантируемой примеси дислоцируется в левой наноколонне рельефа. Существенная части ионов имплантанта проходит не только через правую, но и более толстую центральную наноколонну, теряя каждый раз свою энергию не только при движении в Si, но и при выходе из одной и входе в другую наноколонну материала. Концентрация Р в левой наноколонне достигает максимальных значений 6×10^{21} см $^{-3}$, при значениях около 5×10^{21} см $^{-3}$ в центральной и почти фоновых значениях в правой наноколонне.

Заметим, что в областях повышенной концентрации фосфора (донорной примеси как элемента V группы Периодической системы) в кремнии образуются зоны электронной проводимости (электропроводность n-типа).

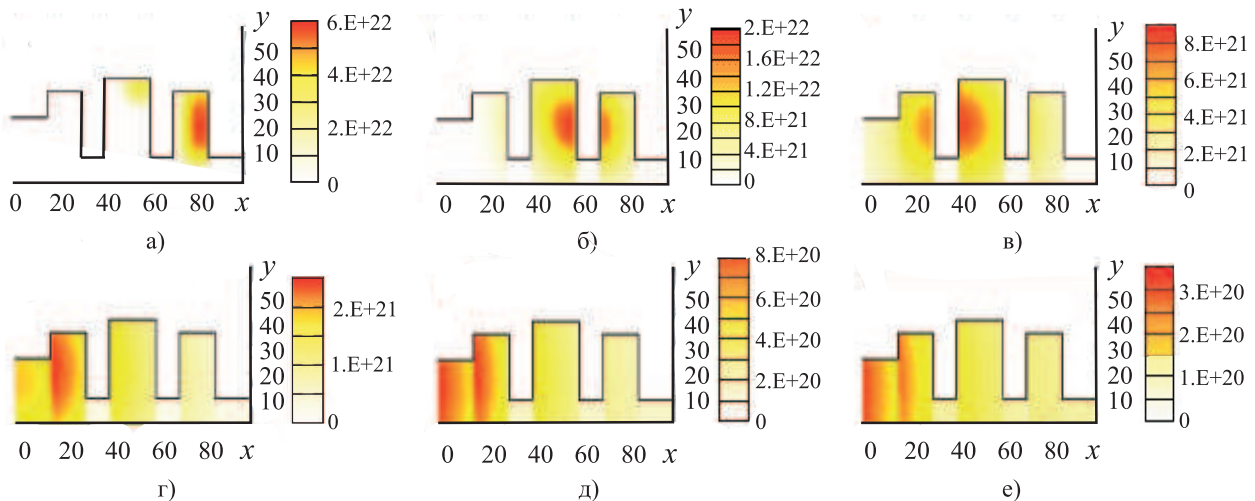


Рис. 3. Имплантация бора В в подложку кремния Si. Распределения концентраций В в Si при вариации энергии имплантации а) 1 эВ, б) 5 эВ, в) 10 эВ, г) 20 эВ, д) 30 эВ и е) 40 эВ

Имплантация бора. Проанализируем влияние энергии имплантации E_I на глубину внедрения бора в пластину с тем же нанорельефом поверхности. На рис. 3 показаны распределения концентрации В в Si при вариации E_I от 1 до 40 эВ.

При $E_I = 1$ эВ (рис. 3а), минимальном значении энергии в данном цикле экспериментов, бор внедряется только в правую наноколонну рельефа. Этот результат аналогичен картине внедрения Р в Si (рис. 2а), однако максимум концентрации бора ($C_B \approx 6 \times 10^{22}$ см $^{-3}$) несколько больше, чем фосфора ($C_P \approx 5 \times 10^{22}$ см $^{-3}$). Отметим, что при одном и том же значении E_I бор внедряется в Si глубже, чем фосфор. Так, при $E_I = 5$ эВ (рис. 3б) бор уже заметно имплантируется не только в правую, но и центральную наноколонну (ср. с рис. 2б). При $E_I = 10$ эВ (рис. 3в) бор имплантируется уже не только в центральную, но и в левую наноколонну, причем уровень максимума концентрации C_B в них практически одинаков. При дальнейшем увеличении E_I до значения 20 эВ (рис. 3г) допинг-домен с максимумом $C_B \approx 2 \times 10^{21}$ см $^{-3}$ находится в левой наноколонне, а в центральной — концентрация C_B существенно меньше, около 0.8×10^{21} см $^{-3}$. Правая наноколонна ионами В “простреливается” почти насквозь, здесь максимум концентрации C_B в среднем на 3 порядка ниже, а около ее правой границы C_B имеет практически фоновое значение. Отметим, что приводимые числовые данные взяты из цифровых таблиц расчета, однако визуально-графическое представление является в целом интегрально более информативным. При $E_I = 30$ эВ (рис. 3д) периферия распределения Гаусса для C_B уже начинает выходить за пределы расчет-

ной области. В физическом смысле это означает, что высокоэнергетичные ионы В пролетают насквозь всю область материала и выходят за ее пределы. Этот процесс заметно усиливается при $E_I = 40$ эВ (рис. 3е). Численно процесс хорошо отслеживается по максимумам значений C_B на цифровых шкалах: 2×10^{21} см⁻³ (шкала рис. 3г), 8×10^{20} см⁻³ (шкала рис. 3д), 3×10^{20} см⁻³ (шкала рис. 3е). Для фосфора этот эффект становится заметным только при $E_I = 40$ эВ (рис. 2е).

Имплантация мышьяка. Поскольку при легировании кремния мышьяк, так же как и фосфор, относится к типу донорных примесей, то он используется для создания в Si доменов с электронной проводимостью и, в частности, может применяться для организации транзисторных каналов n-типа с определенной ориентацией {p-n}-перехода. Однако As имеет существенно больший атомный вес, чем P, поэтому априори, до проведения численных расчетов, можно ожидать несколько иное влияние E_I на глубину и конфигурацию образующихся допинг-доменов As в Si.

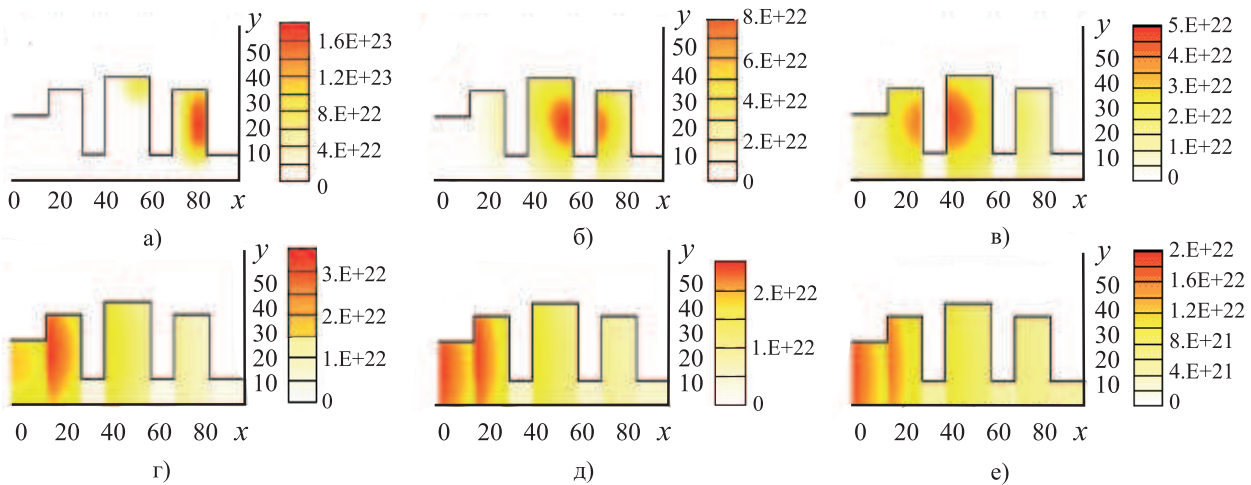


Рис. 4. Имплантация мышьяка As в подложку кремния Si. Распределения концентраций As в Si при вариации энергии имплантации а) 1 эВ, б) 5 эВ, в) 10 эВ, г) 20 эВ, д) 30 эВ и е) 40 эВ

На рис. 4 представлена серия вычислительных экспериментов с вариацией значений E_I от 1 до 40 эВ.

Рассмотрим допинг-домены As, формирующиеся в нанорельефе пластины кремния при минимальном значении $E_I = 1$ эВ (рис. 4а). В правой наноколонне образуется узколокализованная допинг-полоса As с очень высоким максимумом концентрации $C_{As} \approx 1.8 \times 10^{23}$ см⁻³. В экспонируемой верхней части центральной наноколонны формируется допинг-домен с максимумом концентрации около 8×10^{22} см⁻³. Эти характеристики значительно отличаются от характеристик допинг-доменов P (рис. 2а) и, тем более, допинг-доменов В (рис. 3а) с их намного более широкой дислокацией. При увеличении E_I до 5 эВ (рис. 4б) эта допинг-полоса As смещается в центр правой наноколонны, а затем, при $E_I = 10$ эВ (рис. 4в), на ее левый край. В этом эксперименте можно отметить образование допинг-полосы As на правом краю центральной наноколонны рельефа, которая также имеет узколокализованную структуру. Последующее увеличение E_I до 20 эВ (рис. 4г) приводит к перестройке структуры дислокации As. Вместо узколокализованной допинг-полосы внутри центральной наноколонны возникает более размытая конфигурация допинг-домена. При увеличении E_I до 30 эВ (рис. 4д) этот домен приобретает еще более округлую форму со сдвигом в середину центральной наноколонны. Максимум концентрации C_{As} постепенно уменьшается (см. масштабные шкалы на рис. 4). В правой наноколонне значения C_{As} падают почти до фоновых. При $E_I = 40$ эВ (рис. 4е) допинг-домен сдвигается к левому краю центральной наноколонны. Небольшая часть ионов As внедряется в левую наноколонну рельефа, образуя вблизи его края лишь узкую полосу. Напомним, что при этом значении E_I весь левый участок нанорельефа был практически однородно и высоко легирован фосфором (см. рис. 2е) и особенно бором (рис. 3е), с вылетом части ионов В за пределы расчетной области.

4. Легирование наноколонн: обсуждение результатов. Проведенные циклы вычислительных экспериментов дают достаточно полное общее представление о возможности легирования подобных структур нанорельефа методом ионно-лучевой имплантации примесей некоторых типов — донорных (P или As) и акцепторных (B). Выбор типа имплантируемой примеси определяется технологической картой, разработанной для реализации конкретной БИС, СБИС или УБИС (большой, сверхбольшой или ультрабольшой интегральной схемы) в зависимости от того, какой тип проводимости (электронной или дырочной) необхо-

димо создать в какой-либо наноколонне. В ней может быть достигнуто заданное значение коэффициента электропроводности, линейно зависящего от значения концентрации примеси.

Возможно создание в наноколоннах доменов проводимости одновременно и *n*-, и *p*-типа, что может быть обеспечено имплантацией в данную наноколонну последовательно донорной и акцепторной примеси, например фосфора (или мышьяка) и бора.

При этом следует подчеркнуть, что требуются различные значения энергии имплантации E_I для Р (или As) и В.

Приведем конкретный пример E_I для имплантации Р (As) и В преимущественно в центральную наноколонну заданного рельефа поверхности. Оптимум E_I для легирования фосфором (мышьяком) равен 20 эВ (30 эВ), а бора — примерно 7 эВ. Оптимум E_I для легирования правой наноколонны значительно меньше и составляет 5 эВ для Р и около 2 эВ для В. Оптимум E_I для As также, как и для Р, имеет значение около 5 эВ, но при этом для As создается гораздо более узко локализованный профиль распределения концентрации (ср. с рис. 2б и 4б).

Требования к характеристике профиля определяются требованиями к ширине электропроводного канала: при необходимости создания канала наименьшего сечения следует предпочесть для имплантации As (или даже сурьму Sb), поскольку при имплантации Р образуются более широкие проводящие слои.

Следует обсудить еще один важный аспект проблемы. Технически обеспечить процесс легирования при больших значениях угла имплантации α_I труднее, чем при малых. Компьютерное моделирование свободно от этих трудностей.

Так, при $\alpha_I = 0^\circ$ (см. рис. 1а и [1]), с ориентацией виртуального ионного ускорителя в направлении, перпендикулярном дну подложки Si, образуются горизонтальные допинг-структуры, т.е. горизонтальные каналы проводимости. Это не всегда удовлетворяет требованиям технологической карты конструирования СВИС.

Имплантация при вариации α_I до 60° (см. рис. 1б и [2]) при наличии сложного нанорельефа поверхности не всегда может обеспечить создание геометрически линейных каналов проводимости [5], поскольку образующиеся допинг-домены имеют весьма неопределенную форму (“пятна”, “уголки” и т.п.). Кроме того, возникают теневые зоны, когда одни структуры нанорельефа заслоняют от экспонирования другие зоны, а вертикальные участки рельефа почти недоступны для имплантанта, особенно при большой высоте цепочки наноколонн или большой глубине траншей и выемок в пластине.

Таким образом, результаты имплантации при $\alpha_I = 90^\circ$, приведенные в настоящей работе, с моделированием образования фактически линейных вертикально расположенных допинг-полос (каналов проводимости) представляют интерес не только в теоретическом, но и практическом плане.

5. Заключение. В работе проведено компьютерное моделирование одного из важных технологических процессов, применяемых при конструировании новых полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами, — процесса имплантации легирующих примесей в базовую подложку кремния с непланарной поверхностью.

Исследовано влияние параметров процесса (прицельного угла и энергии имплантации) на распределения концентраций примесей фосфора, бора и мышьяка в кремнии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Тарнавский Г.А., Анищик В.С.* Инструментарий NanoMod компьютерной поддержки проектирования наноструктурированных полупроводниковых материалов // *Вычислительные методы и программирование*. 2009. **10**, № 1. 180–196.
2. *Тарнавский Г.А.* Математическое моделирование процессов имплантации в кремний легирующих донорных и акцепторных примесей // *Вычислительные методы и программирование*. 2009. **10**, № 2. 177–184.
3. *Тарнавский Г.А., Жибинов С.Б., Алиев А.В., Тарнавский А.Г.* Современные информационные технологии в нанoeлектронике: прямое компьютерное моделирование процессов производственного цикла создания новых полупроводниковых материалов // *Инфосфера*. 2007. № 35. 48–50.
4. *Тарнавский Г.А., Алиев А.В., Анищик В.С., Тарнавский А.Г., Жибинов С.Б., Чесноков С.С.* Информационные технологии и проблемы создания Центра компьютерного моделирования в Интернете // *Информационные технологии*. 2009. № 8. 68–73.
5. *Тарнавский Г.А., Анищик В.С.* Компьютерное проектирование нанoeлектронных устройств // *Электроника: наука, технология, бизнес*. 2009. № 8. 94–98.

Поступила в редакцию
01.06.2010