

А. М. БЕКИШЕВА, Э. Е. ДАГМАН, Е. Г. ТИШКОВСКИЙ  
(Новосибирск)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИМПЛАНТАЦИИ В МНОГОСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ

Технология создания современных приборов твердотельной электроники представляет собой цепочку большого количества взаимосогласованных операций. Взаимовлияние отдельных технологических операций делает дорогостоящей, а подчас и невозможной экспериментальную проверку вклада различных этапов технологической цепочки в характеристики результирующей сложной структуры.

С другой стороны, все возрастающая тенденция миниатюризации элементов интегральных схем требует исследования свойств и создания моделей физических процессов, протекающих в сверхмалых объемах твердого тела. Объекты для таких исследований также представляют собой сложные структуры, сформированные методами современной технологии.

Моделирование на ЭВМ технологического цикла формирования сложных структур представляет собой разумную альтернативу дорогостоящим физико-технологическим экспериментам по оптимизации и выяснению предельных возможностей существующей технологии.

Расчетные модели процесса ионной имплантации в многослойных структурах. Несмотря на то что имплантация как технологическая операция широко используется в промышленности, целый ряд сопутствующих эффектов изучен лишь на качественном уровне. В первую очередь это относится к пространственному распределению радиационных дефектов и имплантации атомами отдачи. В связи с этим в настоящее время не существует единого пакета программ, в полном объеме моделирующего процесс имплантации.

К настоящему времени имеется значительное число подходов, позволяющих с той или иной степенью точности описывать распределение имплантированной примеси в однослойные мишени [4].

Основная трудность, возникающая при попытке описать пространственное распределение имплантированной примеси в многослойных системах, заключается в корректном описании дисперсии первоначально моноэнергетичного и коллимированного пучка ионов по энергиям и направлениям движения на границах раздела. Если распределение ионов по энергиям и направлениям движения для каждой границы известно, построение профиля с необходимой точностью осуществляется простым применением подходов, развитых для однослойной мишени. Естественно, что все известные к настоящему времени попытки сконцентрированы на том или ином способе описания энергетического спектра ионов на границе раздела.

При этом используют следующие предположения:

- 1) мишень представляет собой среду с неупорядоченным расположением атомов;
- 2) упругое рассеяние ионов на атомах и электронное торможение не коррелированы;
- 3) рассматриваются лишь бинарные столкновения, причем в многокомпонентных мишенях рассеяние на каждом компоненте происходит независимо.

По характеру исходных данных программные пакеты условно можно разбить на две группы.

Программы первой группы используют распределения, рассчитанные для однослойных мишеней, т. е. вид функции распределения ионов по пробегам считается заданным. На этой основе построены программы SUPREM-II (США), STEP (Венгрия), МФТИ (Москва), РИТМ-I (Минск), IMPLPR (ИФП СО АН СССР). Несомненным достоинством

этих программ являются сравнительно небольшие затраты машинного времени и возможность использования экспериментальных и полуэмпирических зависимостей. К недостаткам следует отнести: 1) необходимость поиска табличных данных, согласованных по потенциалам рассеяния, электронным тормозным способностям и т. п., при попытке адаптации этих программ к расчету всего комплекса процессов ионной имплантации; 2) необходимость предварительной физико-технологической проработки при применении программ такого типа к новым и нетрадиционным покрытиям.

Программы второй группы основаны на детальном описании имплантации с помощью потенциалов рассеяния.

Как правило, потенциал представляется в виде (см., например, [6])

$$V(r) = (Z_1 Z_2 q^2 / r) \phi(r/a), \quad (1)$$

где  $\phi(r/a)$  — функция экранирования с параметром  $a$ . В зависимости от энергии иона существуют различные приближения для функции экранирования (см., например, [2]). При известном потенциале уравнение траектории иона в системе центра масс имеет вид

$$\Theta = \pi - 2p \int_R^\infty [r^2 g(r)]^{-1/2} dr, \quad (2)$$

$$\text{где } g(r) = \left[ 1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_r} \right]^{1/2}; \quad E_r = \frac{A}{1+A} E_0; \quad A = \frac{M_1}{M_2}; \quad g(R) = 0;$$

$p$  — прицельный параметр. Из законов сохранения также следует выражение для энергии, теряемой ионом в столкновении:

$$T = \frac{4A}{(1+A)^2} E_0 \sin^2 \frac{\Theta}{2}. \quad (3)$$

В сущности, в программах второй группы определяется параметр  $p$  либо с помощью алгоритмов Монте-Карло [3, 4], либо с помощью уравнения Больцмана [5]. Обобщение на многослойные структуры производится путем замены плотностей и сечения рассеяния при переходе в слой нового материала.

Таким образом, данный подход позволяет получить более детальную информацию о процессах внедрения ионов, легко обобщается на случай многослойных мишеней и особенно полезен при моделировании таких процессов, как имплантация атомами отдачи. Плата за эти преимущества — сравнительно большие затраты машинного времени.

Для потенциалов специального вида удается найти аналитическое выражение для функции распределения ионов по энергии. В работе [7] предложен итерационный метод построения функции распределения имплантированной примеси, справедливый для потенциалов взаимодействия типа  $\alpha/r^2$  (в этом случае интеграл в (2) берется аналитически). В основу подхода положен потенциал взаимодействия, использованный в теории Линдхарда, Шарфа, Шютта (ЛШШ) для расчета потерь на ядерные столкновения [6].

Для потенциалов такого вида решение системы уравнений (2) и (3) позволяет в аналитическом виде связать прицельный параметр и энергию иона после соударения и построить функцию распределения ионов по энергиям:

$$f(\xi) d\xi = \frac{2\pi^2 a^2}{C_E E_0 b^2} \frac{\arccos(1-2\xi) d\xi}{\xi^{1/2} (1-\xi)^{1/2} [\pi^2 - \arccos^2(1-2\xi)]^2}, \quad (4)$$

$$\text{где } \xi = \frac{(1+A)^2}{4A} \left[ \frac{E_1}{E_0} - \left( 1 - \frac{4A}{(1+A)^2} \right) \right], \quad b = (1/\pi N \delta R)^{1/2}$$

— максимальное значение прицельного параметра, определяемое плотностью мишени  $N$  и шагом пространственной дискретизации  $\delta R$ .

Поскольку в данном алгоритме предполагается, что все атомы из слоя  $\delta R$  вынесены на поверхность единичной площадки, средние потери на ядерное торможение находятся путем интегрирования функции распределения в интервале  $(b, \infty)$  с весом, равным энергии отдачи при упругом соударении (3). Средние потери на электронное торможение рассчитываются обычным образом (см., например, [6]). Сдвиг функции распределения позволяет выделить долю остановившихся в слое  $\delta R$  ионов и вычислить выделенную при этом энергию.

Функция распределения после  $m$ -го слоя связана с функцией распределения после  $(m-1)$ -го слоя:

$$f_m(E_1) = \int_{E_e}^{E_u} f(E_1, E_0) f_{m-1}(E_0) dE_0, \quad (5)$$

где  $E_u$  и  $E_e$  — верхний и нижний пределы интегрирования при нормировке.  $E_0$  в (5) имеет смысл энергии до рассеяния на  $m$ -м слое и из-за дисперсии является переменной величиной. Итерационное соотношение (5) позволяет вычислить функцию распределения ионов по энергиям в зависимости от толщины (от номера слоя  $\delta R$ ) и определить все физические величины, с ней связанные.

Описанный выше алгоритм при достаточно разумных предположениях [7] легко обобщается на случай однородной многоэлементной мишени. Этот алгоритм позволяет в принципе рассчитывать не только профиль распределения ионов по толщине мишени, но и профиль распределения потерь энергии. Зная профиль распределения потерь энергии, с помощью соответствующих моделей образования радиационных дефектов [1] можно оценить количество первично смещенных атомов и продвинуться таким образом в описании дефектного состава имплантированного слоя без существенного увеличения машинных ресурсов.

Программная реализация метода функции распределения ионов по энергиям. Основными операциями в современной планарной технологии являются ионная имплантация, термический отжиг и выращивание диэлектрических слоев, причем эти операции реализуются в различной комбинации и последовательности. Последнее обстоятельство обуславливает особенность архитектуры моделирующего программного комплекса: гибкость, обеспечиваемую относительной самостоятельностью программных модулей для реализации той или иной функции или операции, и возможность диалоговой работы с комплексом.

Относительная самостоятельность программных модулей комплекса позволяет модифицировать их по мере совершенствования знаний о физических процессах, лежащих в основе технологических операций. Поэтому несомненный интерес представляет построение адекватного с физической точки зрения пакета программ для мини-ЭВМ. Такой подход оправдан еще и потому, что независимо от объема используемой САПР конкретные задачи технологического цикла удобнее решать на персональном компьютере или автоматизированном рабочем месте проектировщика. Исходя из этого, был разработан программный комплекс RPR, реализующий алгоритм функции распределения ионов по энергиям.

Программный комплекс RPR написан на языке Фортран-IV и может функционировать на СМ ЭВМ и ЕС ЭВМ как самостоятельно, так и в составе различного рода САПР в подсистемах технологического моделирования, предъявляя минимальные требования к объему ОЗУ и составу технических средств. С его помощью можно рассчитать одномерный профиль распределения примесей, имплантированных в многослойную мишень, содержащую в принципе произвольное количество слоев различного по атомному составу вещества.

Программный комплекс RPR [8] функционирует на СМ ЭВМ под управлением операционных систем RT-11 или RSX-11M, используя стандартные библиотеки Фортран-IV. На ЕС ЭВМ программа работает под

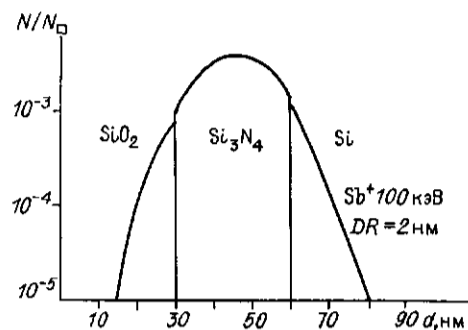


Рис. 1. Пространственное распределение ионов сурьмы, имплантированных с энергией 100 кэВ в структуру диоксид кремния — нитрид кремния — кремний

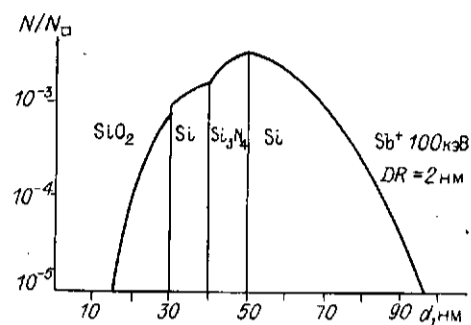


Рис. 2. Пространственное распределение ионов сурьмы, имплантированных с энергией 100 кэВ в структуру диоксид кремния — кремний — нитрид кремния — кремний

управлением любой операционной системы, поддерживающей Фортран-IV.

Общий объем памяти для размещения исходных текстов и скомпилированной программы из загрузочных модулей составляет 30 Кбайт. Требования к объему и составу технических средств минимальны. Так как расчет пространственного профиля ведется итерационно, то при работе на СМ ЭВМ предусмотрена возможность записи промежуточных результатов на диски с тем, чтобы при сбое оборудования минимизировать потери информации и иметь возможность продолжить счет.

При работе на СМ-4 результирующий профиль распределения имплантируемой примеси можно вывести на экран дисплея (или АЦПУ) в виде графика. Время расчета профиля на ЭВМ зависит от требуемой точности получения конечного результата, энергии падающего иона и сложности состава мишени.

Потенциал, выбранный в [7], можно использовать для расчета процессов имплантации в ограниченном диапазоне энергий и масс иона и атомов мишени. Применительно к кремнию — это ионы средних энергий (50—500 кэВ) с атомным номером, близким к сурьме. Рассчитанные программой RPR профили распределения для этого случая в главных моментах практически не отличаются от соответствующих кривых Пирсон IV [9]. Как видно из рис. 1 и 2, программный комплекс позволяет находить распределения ионов в многослойных и многокомпонентных мишенях, корректно отражая изменение тормозных способностей мишени при переходе от слоя к слою.

Как показали модельные расчеты с помощью комплекса RPR, ограничения в применимости потенциала [7] связаны с тем, что приближенный ход сечения рассеяния компенсируется выбранной в [7] зависимостью средних потерь на ядерные столкновения. Именно это обстоятельство резко ограничивает диапазон энергий и масс ионов.

Функциональный вид потенциала взаимодействия естественно определяет структуру программного комплекса, особенно с точки зрения ресурсов малых ЭВМ. При разработке структуры программного комплекса RPR мы ограничились потенциалом специального вида  $\alpha/r^2$ , поскольку, как показано в [10], надежная аппроксимация более реалистичного «универсального» потенциала взаимодействия в зависимости от прицельного параметра имеет такой же функциональный вид. Следовательно, снимается проблема численного интегрирования траектории иона и экономятся ресурсы ЭВМ. Поэтому структура программного пакета позволяет без особых затруднений включить в расчеты аппроксимацию потенциала, предложенную в [10].

Таким образом, разработанный программный комплекс RPR рассчитывает пространственное распределение ионов в многокомпонентных и многослойных мишенях на мини-ЭВМ типа СМ-4, причем точность расчета для тяжелых ионов сравнима с точностью расчетов в однослойных

мишенях методом моментов функции распределения. Структура пакета предусматривает возможность его модификации при необходимости учета более сложной формы потенциала взаимодействия, пространственного распределения дефектов при том же потенциале взаимодействия. Модульная организация пакета RPR позволяет использовать его в качестве подсистемы общего программного обеспечения АСУ ТП.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная фланка полупроводников.— Киев: Наук. думка, 1979.
2. Wang W. M., Vandervorst W., Van Overstaeten R. Impurity profile of implanted ions in Si // Impurity Doping Processes in Si/Ed. F. F. Y. Wang.— N.M.: North Holland Publ. Comp., 1981.
3. Biersack J. P., Haggmark L. G. A Monte-Karlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // Nucl. Instrum. Methods.— 1980.— 14.— P. 257.
4. Posselt M. A short overview on Monte-Karlo simulations of ion beam penetrations into amorphous solids // Proc. Int. Conf. Ion Impl. Semic. other Math. Ion Beam Devices.— Balatonaliga, Budapest, 1985.
5. Antoniadis D. A., Dutton R. W. Models for computer simulation of complete IC fabrication process // IEEE Trans. Electron. Device.— 1979.— ED-26.— P. 490.
6. Lindhard J., Scharff M., Schiott M. Range concepts and heavy ion ranges // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.— 1963.— 33.— P. 1.
7. Furusawa S., Ishiwara H. Range distribution theory based on energy distribution of implanted ions // J. Appl. Phys.— 1972.— 43, N 3.— P. 1268.
8. Бекишева А. М., Дагман Э. Е., Тишковский Е. Г. Моделирование процессов имплантации в многослойные структуры (одномерный вариант 1).— Новосибирск, 1987.— (Препр./ИФП СО АН СССР; 9).
9. Буренков А. Ф., Комаров Ф. Ф., Кумахов М. А., Темкин М. М. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей.— Минск: БГУ, 1980.
10. Biersack J. P., Kruger W., Stuller R. L. Rapid computable formulas for the classical binary collision parameters  $\tau$  and  $\Theta$  // Radiat. Eff. Lett.— 1985.— 85.— P. 193.

*Поступила в редакцию 8 июля 1987 г.*