

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ {311}-ДЕФЕКТОВ В ИОННО-ОБЛУЧЕННОМ КРЕМНИИ

В.И. Белько<sup>1)</sup>, В.Е. Гусаков<sup>2)</sup>, Н.Н. Дорожкин<sup>1)</sup>, О.М. Кондратьева<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Белорусский государственный университет  
220030 Минск, Независимости, 4, belko@bsu.by

<sup>2)</sup>ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению"  
220072 Минск, ул. П. Бровки, 19, gusakov@ifttp.bas-net.by

В работе алгоритм кинетического метода Монте-Карло применяется для моделирования роста кластеров и {311}-дефектов из одиночных междоузлий, образующихся в ионно-облученном кремнии. Используются кинетические константы и параметры, опубликованные в литературе. Результаты сравниваются с расчетами на основе системы уравнений реакции-диффузии с теми же кинетическими константами. Результаты, полученные с помощью метода Монте-Карло, находятся в хорошем соответствии с результатами непрерывной модели. Преимуществами подхода, основанного на кинетическом методе Монте-Карло, является простота и возможность быстро выполнить оценочные расчеты с использованием малой модельной области.

### Введение

Ионная имплантация остается основным методом легирования полупроводников в технологии производства микроэлектронных устройств. Однако избыточная концентрация собственных междоузлий, являющаяся побочным эффектом данного процесса, приводит к так называемой временно-ускоренной диффузии (transient enhanced diffusion) примеси во время постимплантационного отжига. Экспериментально установлено, что продолжительность и интенсивность временно-ускоренной диффузии существенно зависит от поведения сложных дефектов: дислокационных петель, {311}-дефектов и малых кластеров собственных междоузлий. На изучение физических механизмов, управляющих зарождением, ростом и растворением этих дефектов, а также на разработку соответствующих моделей затрачены значительные усилия. Тем не менее, полного и удовлетворительного описания данного комплекса процессов пока не предложено.

Одним из подходов к моделированию эволюции кластеров собственных междоузлий и формирования из них {311}-дефектов является использование систем уравнений реакции-диффузии [1]. Преимущество этого подхода – большие размеры исследуемых объектов и большое достижимое время моделирования. Основным недостатком, как и в случае подхода, основанного на использовании кинетического метода Монте-Карло, связан с необходимостью предварительного расчета (другими методами) кинетических коэффициентов. В некоторых работах предприняты попытки восстановить кинетические коэффициенты по экспериментальным данным, решая обратную задачу [2]. Данная процедура является, по-видимому, неустойчивой, требует искусственного уменьшения числа настраиваемых параметров системы, а экспериментальные данные, как правило, носят опосредованный характер.

В данной работе кинетический метод Монте-Карло применялся для моделирования формирования {311}-дефектов в кристалле кремния в результате роста кластеров собственных междоузлий при температуре 1100 К, образовавшихся после имплантации ионов Si<sup>+</sup> с энергией 40 кэВ и дозой  $2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ .

### Основная часть

Начальное распределение собственных междоузлий в ионно-имплантированном кремнии определялось в соответствии с «+1-моделью», когда на один внедренный атом после первой стадии рекомбинации дефектов приходится одно междоузлие, и описывалось распределением Гаусса с отклонением 24 нм и средним значением 60 нм. Область моделирования – прямоугольный параллелепипед, на левой и правой границах которого по одной из пространственных переменных задавались нулевые граничные условия, и периодические условия – по двум другим.

Набор входных параметров для метода Монте-Карло взят из работы [1]. Кинетические константы обратных реакций для кластеров размера  $n$  (распад кластеров) при температуре  $T$  имеют вид:

$$k_-(n) = \alpha(n) \cdot D_I f^{eq} \cdot \exp(E^i(n+1)/(k_B T)),$$

где для произведения  $D_I f^{eq}$  использована аппроксимация из работы [1] вида  $D_I \cdot f^{eq} = 10^{A+B\tau}$ ,  $A=21.94$ ,  $B=-20.62577$ ,  $\tau=1000/T$ . В свою очередь,  $D_I$  – коэффициент диффузии одиночных междоузлий,  $f^{eq}$  – равновесная концентрация одиночных междоузлий. Равновесная концентрация свободных междоузлий ( $f^{eq}$ ) при данной температуре  $T$  взята из работы [3]:

$$f^{eq} = 1.35 \cdot \exp(-1.37/(k_B T)).$$

Далее, функция  $\alpha(n)$  описывает эффективный радиус захвата одиночного междоузлия кластером размера  $n$ . Аппроксимация для нее из работы [1]: для размеров кластеров  $n=1..9$   $\alpha(n) = 0.2e-6 \cdot n \cdot 0.358$ ; для  $n \geq 10$  –  $\alpha(n) = 2.4347e-6 + 3.1441e-8 \cdot n$ . Следовательно, критический размер кластеров, при котором происходит переход их в качественно новое состояние ({311}-дефекты), принят равным  $n=10$ . При переходе в это новое состояние значения коэффициентов прямых реакций скачкообразно увеличиваются. При этом предполагается, что форма малых кластеров – сферическая, форма {311}-дефектов – прямоугольный параллелепипед высотой в один атомный слой, а возникающие в среде напряжения неявно учитываются с помощью вектора Бюргерса. И, наконец,  $k_+(n) = \alpha(n) \cdot D_I$  – константы прямых реакций (захват мономеров кластерами размера  $n$ ).

Основная цель работы [1] – моделирование формирования {311}-дефектов в кристалле кремния с использованием численного решения системы уравнений реакции-диффузии. Полученные результаты – зависимость числа свободных междоузлий от времени в ионно-имплантированном кремнии в течение постимплантационного отжига и изменение среднего размера образующихся {311}-дефектов при температурах от 900 до 1100 К – сравниваются с экспериментальными данными из [4]. Однако, явные значения коэффициента диффузии одиночных междоузлий не приводятся (указана лишь величина  $D_{I^{eq}}$ ). Более того, эта величина меняется от одного расчета к другому без точного объяснения способа изменения. Поэтому сравнивать результаты, полученные кинетическим методом Монте-Карло, с теоретическими результатами из [1] и экспериментальными данными из [4] было нецелесообразно.

Для тестирования полученной в работе реализации метода Монте-Карло использовались данные из [5], где соответствующая начальная краевая задача для системы уравнений реакции-диффузии аппроксимировалась с помощью неявной адаптивной разностной схемы, которая решалась затем итерационным методом. Основным ограничением, вызванным необходимостью достижения больших времен моделирования, было ограничение на число уравнений  $N = 100$ . Отметим также, что, в отличие от метода Монте-Карло, на левой границе расчетной области использовалось граничное условие 3 рода (поток одиночных дефектов через поверхность пропорционален разности текущей и равновесной концентраций дефектов).

На рисунках 1, 3 приводятся результаты расчетов кинетическим методом Монте-Карло: зависимость полного числа междоузлий и числа свободных междоузлий от времени и эволюция образующихся {311}-дефектов. Также (рисунки 2, 4) показаны аналогичные результаты для непрерывной модели, основанной на решении системы уравнений реакции-диффузии.

Время, при котором все свободные междоузлия уходят через границы или оказываются захваченными в кластеры, равно  $10^8$  нс – несколько меньше, чем полученное в рамках непрерывной модели. Начало формирования {311}-дефектов – приблизительно  $10^7$  нс, далее, при  $t \sim 10^{11}$  нс {311}-дефекты начинают растворяться. Средний максимальный размер, которого они достигают, 450-500 междоузлий. Следует отметить, что размер области моделирования, по-видимому, оказывает влияние на максимальный размер кластеров. Чем меньше расчетная область, тем меньше дефектов имеется в начале моделирования в качестве «строительного материала» для больших кластеров.

## Заключение

В данной работе рассматривается применение алгоритма кинетического метода Монте-Карло для описания роста кластеров и {311}-дефектов из одиночных междоузлий, образующихся в ионно-облученном кремнии.

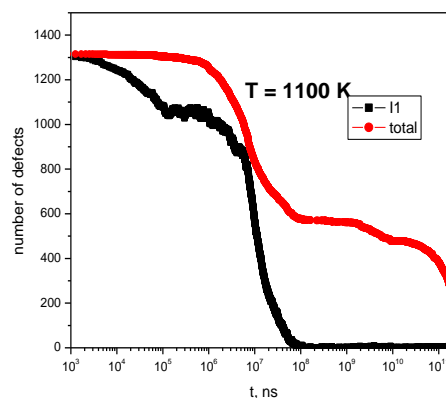


Рис. 1. Зависимость от времени полного числа междоузлий и количества свободных междоузлий в образце при температуре 1100 К, полученная методом Монте-Карло

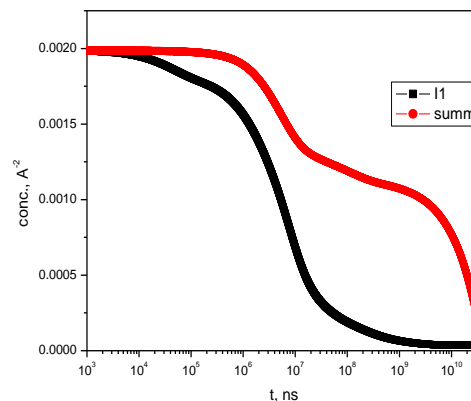


Рис. 2. Зависимость от времени полного числа междоузлий и количества свободных междоузлий в образце при температуре 1100 К, полученная в рамках непрерывной модели

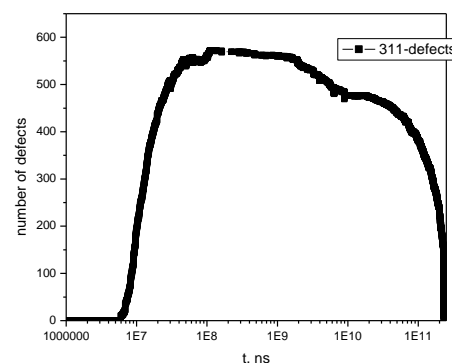


Рис. 3. Зависимость от времени количества междоузлий в {311}-дефектах при температуре 1100 К, полученная методом Монте-Карло

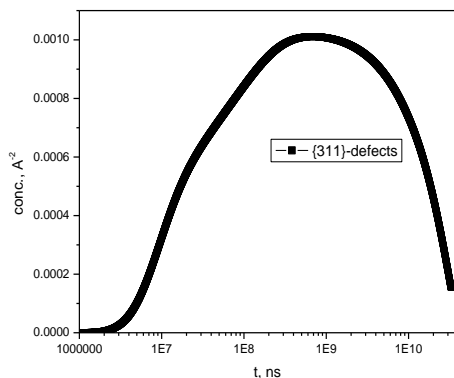


Рис. 4. Зависимость от времени количества междоузлий в {311}-дефектах при температуре 1100 К, полученная в рамках непрерывной модели

Используются кинетические константы из работы [1], результаты сравниваются с расчетами в рамках непрерывной модели – системы уравнений реакции-диффузии с теми же кинетическими константами. Результаты, полученные с помощью метода Монте-Карло, находятся в хорошем

соответствии с расчетами в рамках непрерывной модели. Преимуществами подхода, основанного на кинетическом методе Монте-Карло, является простота и возможность быстро выполнить оценочные расчеты с использованием малой модельной области.

#### Список литературы

1. Ortiz C.J., Cristiano F., Colombeau B., Claverie A., Cowern N.E.B. // *Materials Science and Engineering B*. – 2004. – V. 114–115. – P.184–192.
2. Heitzinger C., Selberherr S. // *Microelectronics Journal*. – 2004. – V. 35. – P.167–171.
3. Stolk P.A., Gossmann H.J., Eaglesham D.J. and Poate J.M. // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. – 1995. – V.96. – P. 187.
4. Cowern N.E.B., Mannino G., Stolk P.A., Roozeboom F., Huizing H.G.A., van Berkum J.G.M., Cristiano F., Claverie A., Jaraiz M. // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V.82 (22). – P. 4460.
5. Белько В.И., Лемешевский С.В., Чуйко М.М. Отчет по НИР 1.3.01 «Развитие методов решения некорректных задач теории управления распределенными динамическими системами и их приложений в математической физике» (ГПНИ «Конвергенция»). – Минск. – 2012. – 39 с.

### SIMULATION OF {311}-DEFECTS FORMATION IN ION-IMPLANTED SILICON

V.I. Belko<sup>1)</sup>, V.E. Gusakov<sup>2)</sup>, N.N. Dorozhkin<sup>1)</sup>, O.M. Kondratjeva<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Belarusian State University, Minsk, Belarus, belko@bsu.by

<sup>2)</sup>Scientific-Practical Materials Research Center of NAS, Minsk, Belarus

In the paper an algorithm of kinetic Monte-Carlo method was applied to model the cluster and {311}-defect growth in ion-implanted silicon starting from initial distribution of free interstitials. Kinetic constants and parameters were taken from the literature. The simulation results were compared with those of continuous model based on the system of diffusion-reaction equations with the same kinetic constants. The results obtained with a Monte-Carlo method are in good agreement with predictions of continuous model. Advantages of the Monte-Carlo based approach are simplicity and possibility to perform calculations in short time using a small model sample to get preliminary estimations.