

# Моделирование технологических процессов

## Лекция 2

# Вопросы к экзамену

- Принцип суперпозиции при расчете функций распределения примеси.
- Аналитические аппроксимации распределения ионов. Функции Гаусса.
- Аналитические аппроксимации распределения ионов. Распределение Пирсона-IV.
- Аналитические аппроксимации распределения ионов, учитывающие эффект каналирования.
- Особенности моделирования ионной имплантации в многослойных мишенях.

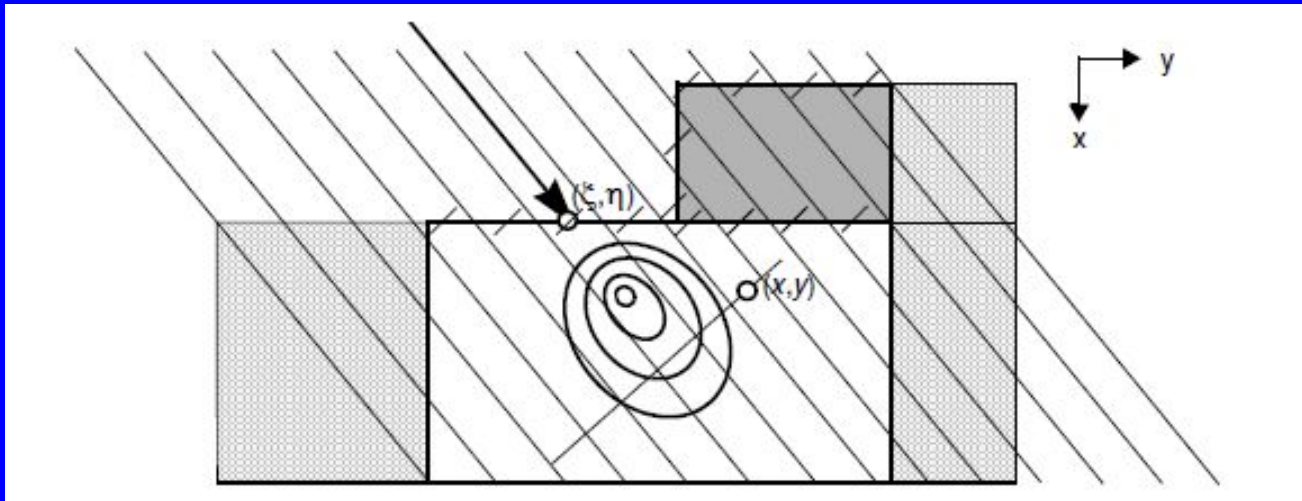
# Принцип суперпозиции при расчете функций распределения примеси

Во время имплантации ионы внедряются в подложку через открытые участки внешней поверхности и рассеиваются внутри подложки в трех измерениях. Проекция ионного пучка в двумерной плоскости моделирования зависит от углов поворота и наклона подложки и может приводить к **несимметричным профилям распределения примеси в окрестностях краев маски.**

Предположим, что ионный пучок, падающий в точку внешней границы с координатами  $(\xi, \eta)$  создает в подложке функцию распределения  $\Phi(x, y, \xi, \eta)$ . Тогда в любой точке  $(x, y)$  внутри подложки концентрация примеси будет вычисляться как суперпозиция функций распределения, исходящих от всех точек падения ионного пучка, т.е. от всех точек внешней границы структуры:

$$N(x, y) = \int_{S_{out}} \Phi(x, y, \xi(s), \eta(s)) ds$$

## Распределение примеси вблизи краев маски



$$F(x, y, \xi, \eta) = f_p(x - \xi(s)) \cdot f_l(y - \eta(s))$$

Для того чтобы сравнивать концентрацию имплантированных ионов с экспериментальными одномерными ВИМС – профилями, двумерный профиль представляется как произведение двух ортогональных функций: основной функции  $f_p(x)$  и латеральной функции  $f_l(y)$ :

# Моделирование имплантации методом Монте – Карло

В современных системах моделирования наиболее точно распределение примеси при ионной имплантации рассчитывается с использованием метода Монте – Карло.

С помощью метода Монте – Карло моделируются физические события, происходящие при торможении отдельных частиц. Результатом моделирования торможения достаточно большого числа частиц является случайное распределение их траекторий. Для получения достоверных результатов требуется рассчитать, как правило, от 10 до 30 тысяч отдельных траекторий.

При использовании метода Монте - Карло необходимо задавать ориентацию кристаллографических осей относительно базового среза.

# Кристаллографическая ориентация координатных осей подложки

Ориентация подложки	$X_w$	$Y_w$	$Z_w$
100	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
111	$\langle 211 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$

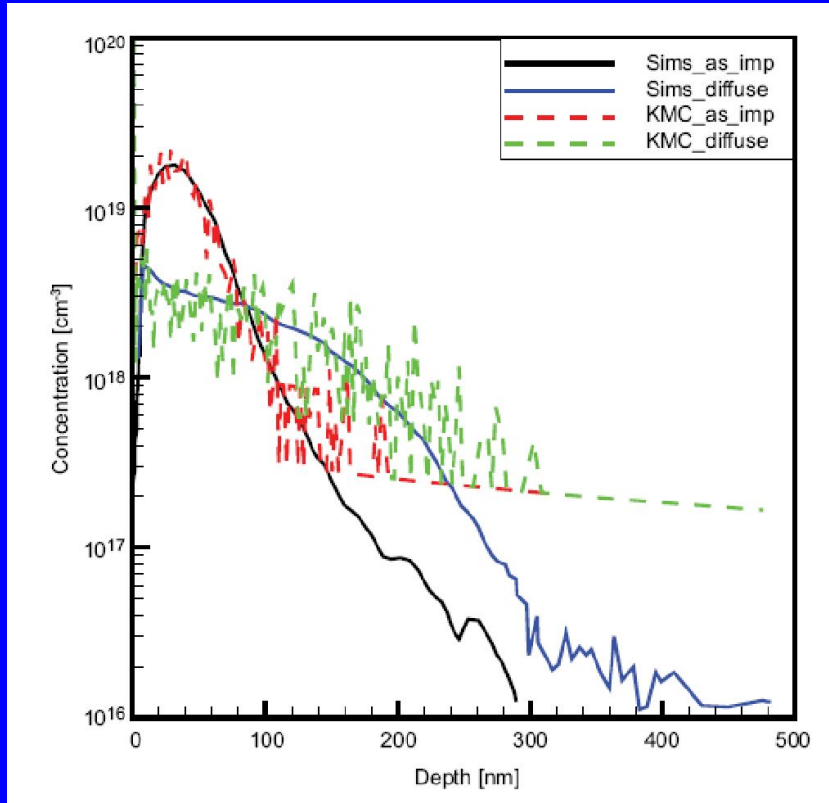
## Основная проблема метода Монте – Карло:

большая вычислительная трудоемкость.

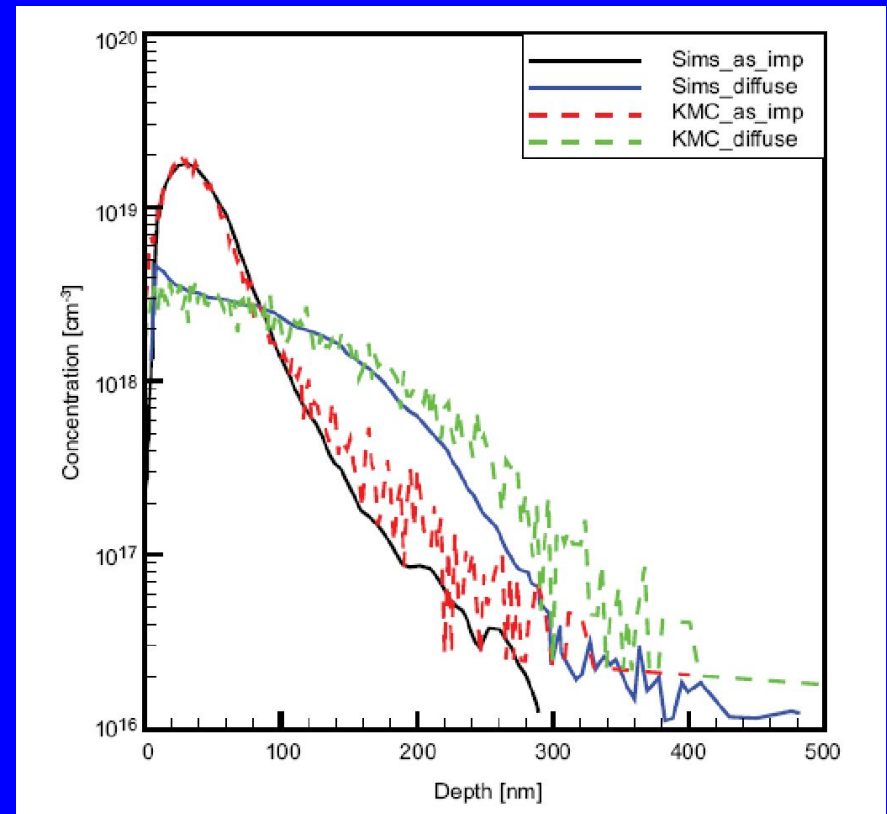
Важно оптимизировать время, затрачиваемое на вычисление каждой отдельной траектории. Это достигается, в основном, двумя способами:

- выбором эффективных оценок для средней длины свободного пробега между столкновениями с учетом энергии частицы;
- применением эффективных алгоритмов и аппроксимаций при вычислении угла рассеяния.

# Моделирование методом Монте-Карло имплантации P(30 КэВ, $1e14$ ) и отжига (800 С, 15 мин.)



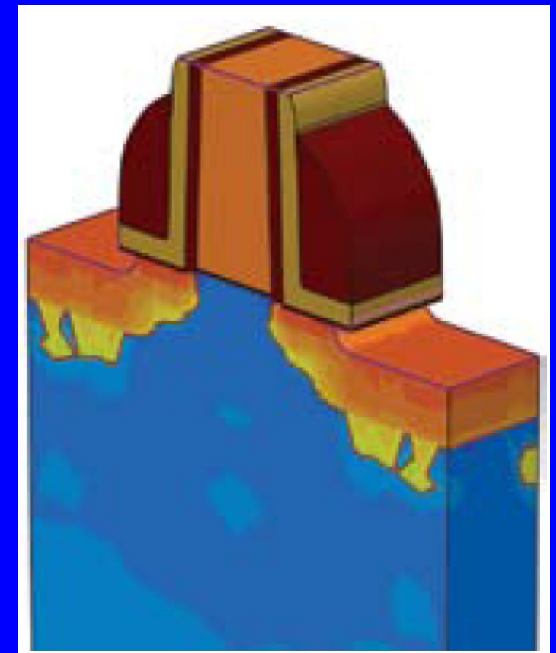
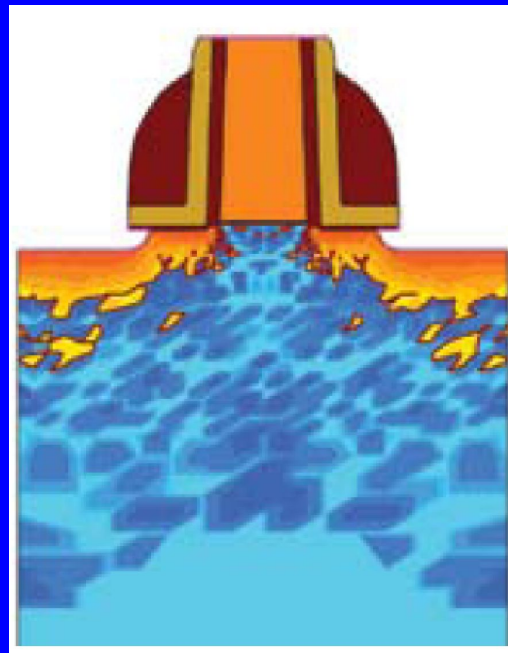
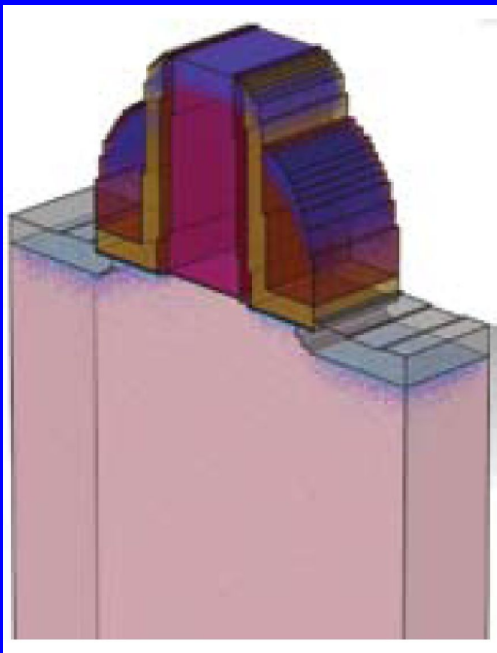
1 эксперимент



Усреднение по 20-ти экспериментам



Для наноразмерных структур необходимо учитывать дискретный характер легирования. Результаты получают методом Монте-Карло



# Аналитические аппроксимации распределения ионов. Функция Гаусса

В соответствии с классической теорией ЛШШ и диффузионной моделью Бирсака профили имплантированных ионов должны описываться гауссовскими распределениями. Аппроксимация распределения ионов по нормальному закону - распределение Гаусса является симметричным распределением и характеризуется двумя параметрами:

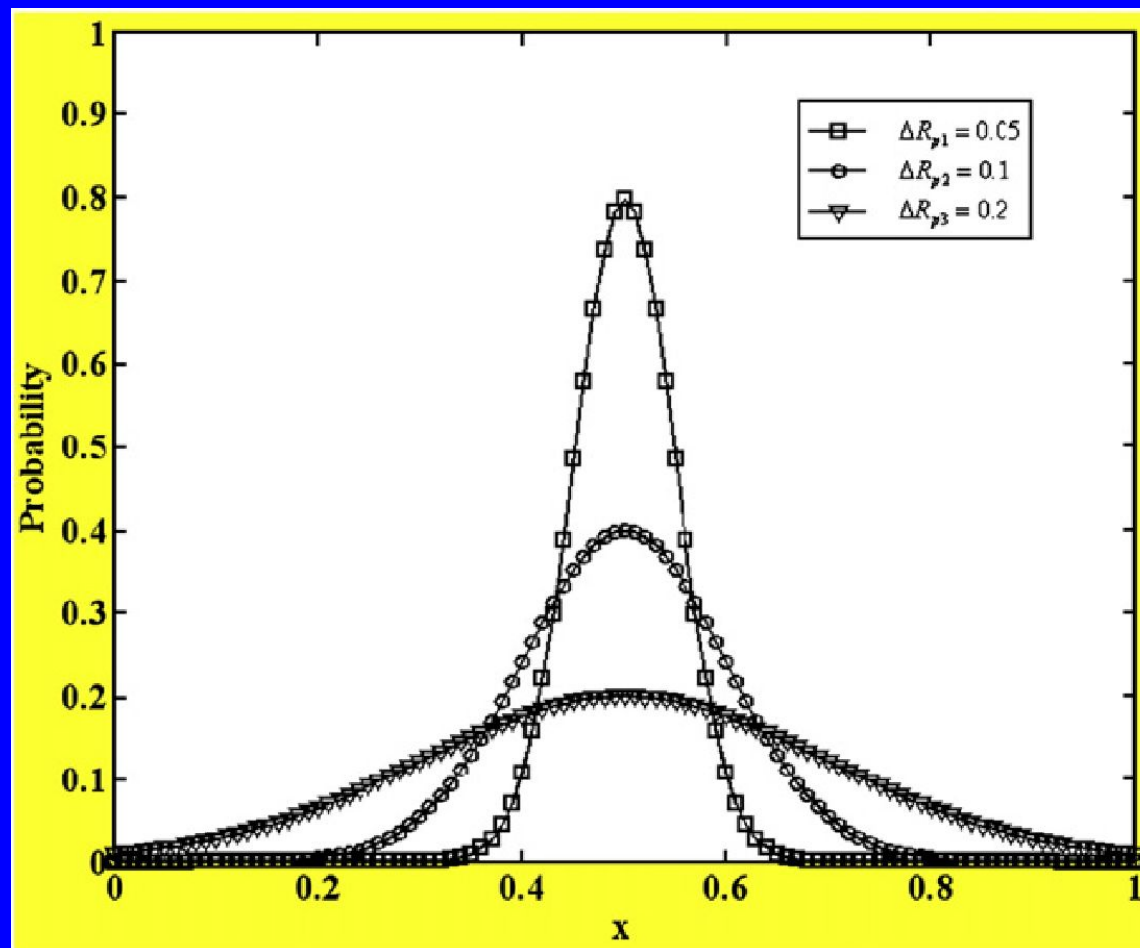
$$N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{D}{\sigma_P} \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_P^2}\right]$$

где  $D$  – доза имплантированной примеси,  $\text{см}^{-2}$ ,

$R_P$  средняя проекция пробега ионов и

$\sigma_P$  среднеквадратичное отклонение проекции пробега

# Распределения, описываемые симметричной функцией Гаусса с различным среднеквадратичным отклонением



# Параметры функции распределения Гаусса для основных типов примеси, нм

Энергия	E = 20 кэВ		E = 40 кэВ		E = 100 кэВ	
Примесь	$R_P$	$\sigma_P$	$R_P$	$\sigma_P$	$R_P$	$\sigma_P$
B	79	32	153	50	344	83
P	28.5	13	53	22	132	46
As	18	7	30	11.5	62	22

# Двойное сопряженное распределение Гаусса (асимметричное)

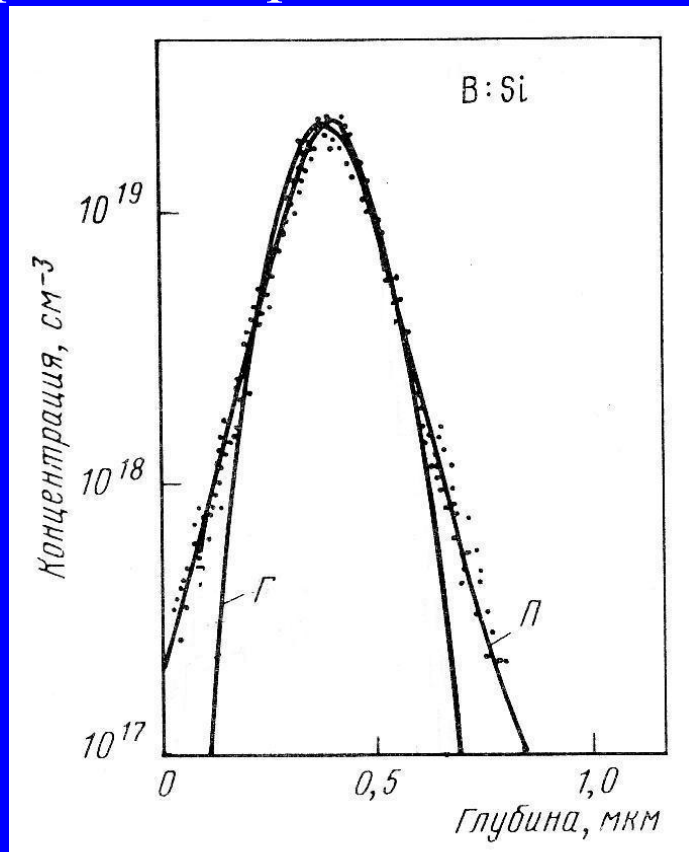
$$N(x) = \begin{cases} D \cdot n_0 \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_P^2}\right], & \text{при } x \leq R_P \\ D \cdot n_0 \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_{P2}^2}\right], & \text{при } x > R_P \end{cases}$$

$$\frac{1}{n_0} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[ \sigma_P \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{R_P}{\sigma_P \sqrt{2}}\right) + \sigma_{P2} \right] \approx \sqrt{\frac{\pi}{2}} [\sigma_P + \sigma_{P2}]$$

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy \quad \text{функция ошибок}$$

# Функция распределения Пирсона-IV

имеет 4 параметра, определяемые из первых четырех моментов: средний проективный пробег, среднеквадратичное отклонение, асимметрия, эксцесс



Сравнение распределений Гаусса и Пирсона с экспериментально полученными распределениями бора после имплантации с энергией  $E = 150$  кэВ и дозой  $D = 5 \cdot 10^{14}$   $\text{cm}^{-2}$

Функция распределения Пирсона-IV является решением дифференциального уравнения

$$\frac{d}{dz} f(z) = \frac{z - a}{b_0 + b_1 z + b_2 z^2} f(z)$$

где  $z = x - R_p$

$$N(x) = DK \cdot [b_2(x - R_p)^2 + b_1(x - R_p) + b_0] \times \exp \left[ \frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right]$$

$$a = b_1 = -\gamma\sigma_p(\beta + 3)/A \qquad b_2 = -(2\beta - 3\gamma^2 - 6)/A$$

$$b_0 = -\sigma_p^2(4\beta - 3\gamma^2)/A \qquad A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$$

# Параметры функции распределения Пирсона-IV

$$R_P = \mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$$

– средний проективный пробег, он же 1-ый момент функции распределения;

среднеквадратичное отклонение -

$$\sigma_P = (\mu_2)^{1/2}$$

$$\gamma = \mu_3 / \sigma_P^3 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - R_P)^3 N(x) \cdot dx / (D\sigma_P^3)$$

- асимметрия

эксцесс, характеризует плавность  
вблизи вершины -

$$\beta = \mu_4 / \sigma_P^4 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - R_P)^4 N(x) \cdot dx / (D\sigma_P^4)$$

где  $\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_P)^i f(x) dx$  - i-ый момент функции распределения



# Асимметрия $\gamma$ функции распределения Пирсона-IV

При  $\gamma = 0$ :

максимум распределения Пирсона лежит в  
точке  $R_{MAX} = R_p$  ,  $N_{MAX} = N(R_p)$ ;

При  $\gamma < 0$ :

пик находится глубже  $R_p$  ( $R_{MAX} > R_p$ ) и кривая  
распределения справа от максимума падает  
быстрее, чем слева.

При  $\gamma > 0$ :

верно обратное утверждение ( $R_{MAX} < R_p$ )

**Аналитические аппроксимации  
распределения ионов, учитывающие  
сильную асимметрию и эффект  
каналирования**

# Распределение Гаусса с обобщенным ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ «ХВОСТОМ»

$$N(x) = \begin{cases} D \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{n_0}{\sigma_P} \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_P^2}\right], & \text{при } x \leq R_P + \sigma_P \\ D \cdot n_0 k \cdot \left( \frac{1}{\sigma_P \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_P^2}\right] + \frac{1}{\sigma_P \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{x - R_P}{l_{\text{exp}}}\right)^\alpha\right] \right), & \text{при } x > R_P + \sigma_P; \end{cases}$$

$D$  – доза имплантированной примеси, 1/ см-3,

$R_P$  - средняя проекция пробега ионов

$\sigma_P$  - среднеквадратичное отклонение проекции пробега

$k$  – коэффициент, обеспечивающий непрерывность в точке  $x = R_P + \sigma_P$

$n_0$  – обратное значение нормы функции распределения,

$\alpha, l_{\text{exp}}$  – параметры распределения в «хвостовой» части.

# Распределение Пирсона -IV с линейно-экспоненциальным хвостом

$$N(x) = \begin{cases} N_P(x), & 0 \leq x \leq x_{\max} \\ N_T(x), & x_{\max} \leq x \leq x_a \\ N_l(x), & x_a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

$N_P(x)$  - распределение Пирсона -IV

$N_T(x)$  - функция распределения в переходной области

$N_l(x)$  - функция распределения в «хвостовой» части

$x_{\max}$  - координата максимума функции распределения Пирсона

$$N_{\max} = N_P(x_{\max})$$

$x_a$  - координата точки, в которой концентрация примеси равна половине максимального значения

$$N_a = N_P(x_a) = \frac{1}{2} N_{\max}$$

## Функция распределения в «хвостовой» части

$$N_l(x) = N_P(x) + \left( \frac{x - x_{\max}}{l_{\text{exp}}} \right) \cdot N_P(x_{\max}) \exp\left( -\frac{x - x_{\max}}{l_{\text{exp}}} \right)$$

# Распределение Пирсона -IV с линейно-экспоненциальным хвостом в переходной области

$$N_T(x) = N_P(x_{\max}) \cdot \exp\left(A(x - x_{\max})^2 + B(x - x_{\max})^3\right)$$

А и В определяются из условий непрерывности функции и производной в точке  $x = x_a$ :

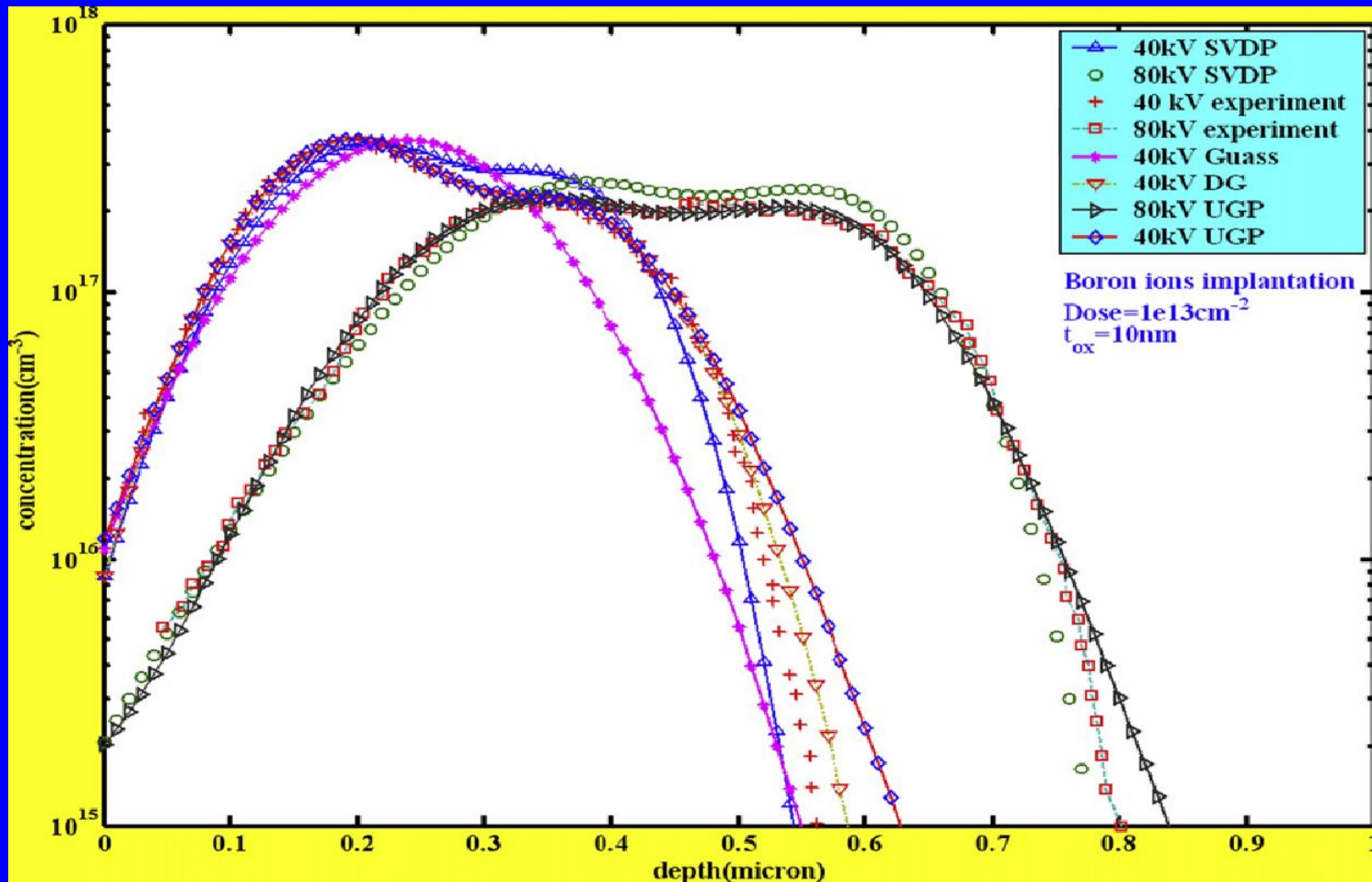
$$N_l(x_a) = N_T(x_a) \quad \frac{d}{dx} N_l(x) = \frac{d}{dx} N_T(x) = N'_a$$

$$A = \frac{3 \ln(N_a / N_{\max})}{(x_{\max} - x_a)^2} + \frac{N'_a}{N_a (x_{\max} - x_a)}$$

$$B = \frac{2 \ln(N_a / N_{\max})}{(x_{\max} - x_a)^3} + \frac{N'_a}{N_a (x_{\max} - x_a)^2}$$

# Объединенное распределение Гаусса –Пирсона –IV

$G(z)=(1-Rg)Nf(z)+RgH(z); Rg= Dp/(Dp+Dg)$



## Латеральное распределение примеси

$$f(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_L(y)} \exp \left[ -\frac{x^2}{2\sigma_L^2(y)} \right]$$

Латеральное распределение описывается функцией Гаусса со среднеквадратичным отклонением, зависящим от глубины

Зависимость от глубины может быть описана с помощью вектора пяти параметров (p1...p5).

# Распределение постимплантационных дефектов

Для описания распределения постимплантационных дефектов так же, как для распределения примеси используются две ортогональные функции

Основная функция может быть трех типов:

Простая функция Гаусса

Для легких ионов примеси с экспоненциальным хвостом, направленным к поверхности подложки

Для тяжелых ионов с экспоненциальным хвостом, направленным вглубь подложки

Для латерального распределения постимплантационных дефектов используются те же функции, что и для латерального распределения примеси со среднеквадратичным отклонением, зависящим от глубины



# Функции распределения ПОСТИМПЛАНТАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

$$f_p(x) = N_{FP} k \cdot \exp \left[ -\frac{(x - R_p)^2}{2\sigma_p^2} \right]$$

$$f_p(x) = \begin{cases} N_{FP} k_1 \exp\left(\frac{x}{l}\right), & x < x_0 = R_p - \frac{\sigma_p^2}{l} \\ N_{FP} k_2 \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right), & x > x_0 \end{cases}$$

ДЛЯ ЛЕГКИХ ИОНОВ

ДЛЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ

$$f_p(x) = \begin{cases} N_{FP} k_2 \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right), & x < x_0 \\ N_{FP} k_1 \exp\left(\frac{x}{l}\right), & x > x_0 \end{cases}$$

$N_{FP}$  – число Френкелевских дефектов на ион,  $k$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  – нормирующие множители

# Распределение примеси в многослойных мишенях

Если имплантация осуществляется в многослойную структуру, содержащую слои различных материалов, функции распределения примеси должны корректироваться с учетом эффективности торможения в вышележащих слоях.

Используется два подхода:

- коррекция параметров функции распределения;
- коррекция дозы.

# Коррекция параметров функции распределения

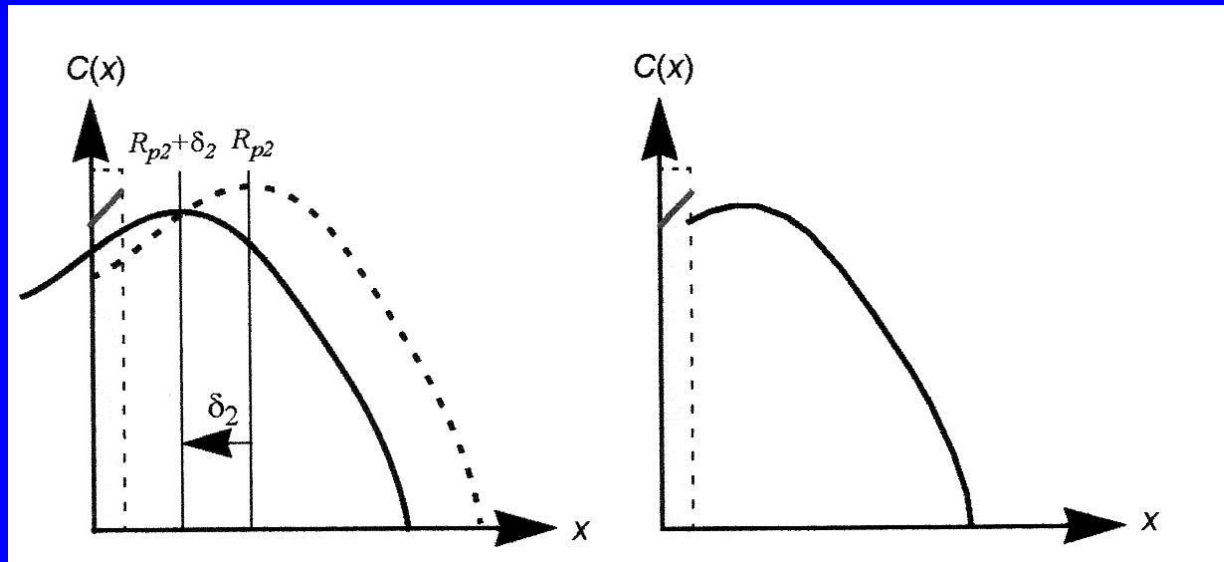
При коррекции параметров распределения различие в тормозной способности слоев оценивается по отношению значений среднего проективного пробега в различных материалах.

Рассчитывается сдвиг профиля в  $i$ -ом слое

$$\delta_i = \sum_{j=1}^{j<i} t_j \left( 1 - \frac{R_{Pi}}{R_{Pj}} \right)$$

где  $t_j = d_j - d_{j-1}$  — толщина  $j$ -го слоя

## Коррекция параметров распределения в двухслойной мишени



сдвиг функции  
распределения во втором  
слое; пунктиром показано  
распределение примеси  
для однородной подложки  
из материала 2-го типа

результатирующее  
распределение примеси

## Коррекция дозы

При коррекции дозы сдвиг профиля вычисляется, исходя из дозы, поглощенной вышележащими слоями:

$$\delta_i = d_i - d_{eff}$$

$$D_{eff} = \int_0^{d_{eff}} f_P(x) dx$$

$d_i$  – положение верхнего края  $i$ -го слоя

# Сдвиг профиля при имплантации в двухслойную мишень

для функции распределения Гаусса доза, поглощенная в первом слое равна

$$D_1 = \frac{D}{2} \left( 1 + \operatorname{erf} \frac{R_{P1} - d_1}{\sqrt{2}\sigma_{P1}} \right) = \frac{D}{2} \left( 1 + \operatorname{erf} \frac{R_{P2} - d_{\text{eff}}}{\sqrt{2}\sigma_{P2}} \right)$$

$$\operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-z^2} dz$$

- интеграл вероятности

Находим сдвиг функции распределения по поглощенной эффективной дозе:

$$\left( \frac{R_{P1} - d_1}{\sqrt{2}\sigma_{P1}} \right) = \left( \frac{R_{P2} - d_{\text{eff}}}{\sqrt{2}\sigma_{P2}} \right)$$

$$d_{\text{eff}} = R_{P2} - (R_{P1} - d_1) \frac{\sigma_{P2}}{\sigma_{P1}}$$

$$R_{P2}^{\text{eff}} = R_{P2} - (d_{\text{eff}} - d_1) = (R_{P1} - d_1) \frac{\sigma_{P2}}{\sigma_{P1}} + d_1$$

# Моделирование распыления мишени

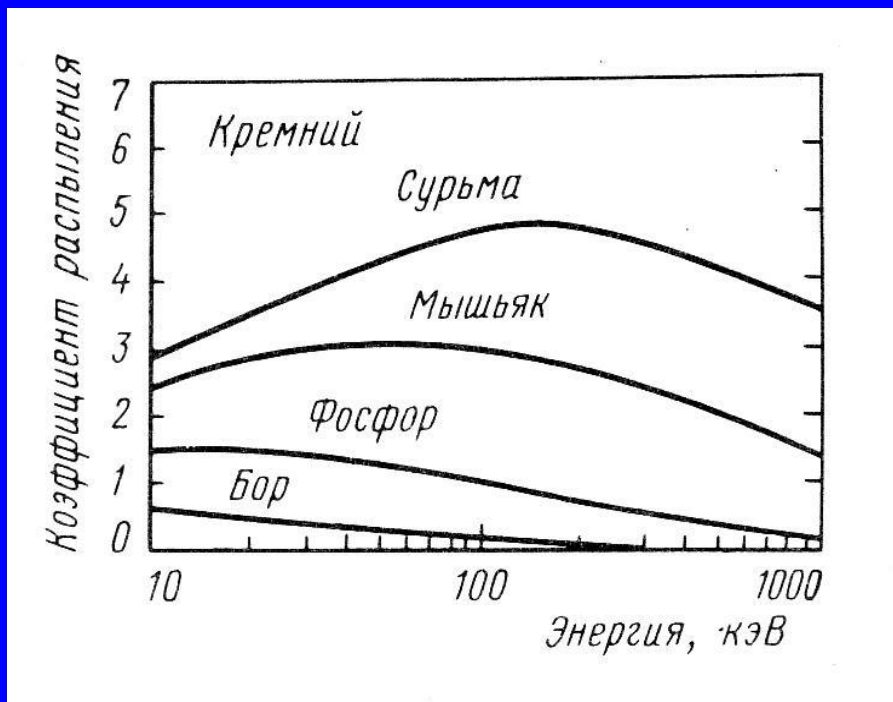
При анализе ионной имплантации эффектом распыления обычно пренебрегают. Однако его следует учитывать, когда имплантация производится высокой дозой ионов с низкой энергией, что необходимо для формирования мелкозалегающих p-n переходов. Основным параметром процесса распыления является коэффициент распыления  $S$ , численно равный количеству атомов подложки, выбиваемых с поверхности ионом примеси. При направлении ионного пучка нормальном к поверхности коэффициент распыления равен

$$S = \frac{3}{4} \cdot \frac{S_n(E) \cdot \alpha(M_2 / M_1)}{\pi^2 C_0 U_0}$$

$S_n(E)$  – ядерная тормозная способность,

$\alpha(M_2 / M_1)$  – численно определяемая функция,  $U_0$  – поверхностная энергия связи,  $U_0 = 7.81$  для кремния,  $C_0$  – константа

# Зависимость коэффициентов распыления кремния ионами мышьяка, сурьмы, бора и фосфора от энергии



Зная коэффициент распыления, можно вычислить толщину распыленного слоя кремния

$$d_s = \left( \frac{S}{N_{Si}} \right) \cdot D$$

где  $N_{Si} = 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  для кремния,  
 $D$  – доза имплантации



# Калибровка моделей ионной имплантации по ВИМС профилям

