УДК 661.666:620.198

В.А. Скачков, Т.В. Критская, О.Р. Бережная

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В НЕОДНОРОДНОМ ПОЛЕ МИКРОНАПРЯЖЕНИЙ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Рассмотрен диффузионный перенос легирующих атомов в поле градиента механических напряжений. Случайное поле градиента механических напряжений определяется из решения статистической краевой задачи микромеханики неоднородных сред с учетом изменения механических характеристик отдельных кристаллов, обусловленного диффузионным перемещением атомов.

Ключевые слова: *примесные атомы, кристаллиты, кристаллографические, лабораторные оси координат, микроструктурные напряжения, деформации, диффузия, градиент микронапряжений*.

Форм. 20. Лит.10.

В.О. Скачков, Т.В. Критська, О.Р. Бережна

МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНЕСЕННЯ ДОМІШКОВИХ АТОМІВ У НЕОДНОРІДНОМУ ПОЛІ МІКРОНАПРУГ ПОЛІКРИСТАЛІВ

Розглянуто дифузійне перенесення легуючих атомів в полі градієнта механічної напруги. Випадкове поле градієнта механічної напруги визначається з рішення статистичної крайової задачі мікромеханіки неоднорідних середовищ з урахуванням зміни механічних характеристик окремих кристалів, обумовленої дифузійним переміщенням атомів.

Ключові слова: *домішкові атоми, кристаліти, кристалографічні, лабораторні осі координат, мікроструктурна напруга, деформації, дифузія, градієнт мікронапруг*.

V. Skachkov, T. Kritskaya, O. Berezhnaya

A DESIGN OF TRANSFER OF ADMIXTURE ATOMS IS IN THE HETEROGENEOUS FIELD OF MICROTENSIONS OF POLICRYSTALS

The diffusive transfer of dopant atoms is considered in the field of mechanical tensions gradient. The casual field of mechanical tensions gradient is determined by the solving of statistical regional task of micromechanics of variegated environments taking into account the change of mechanical descriptions of separate crystals, caused by the diffusive moving of atoms.

Keywords: *impurity atoms, crystallites, crystallography, laboratory axes of coordinates, microstructure tensions, deformations, diffusion, gradient of microtensions*.

Актуальность темы. Явления переноса в поле микронапряжений в настоящее время детально изучаются при конструировании микроэлектронных и электроннооптических систем. Так, деформационные поля, обусловленные наличием квантовых точек в гетероструктурах, позволяют активно управлять рядом оптических свойств полупроводниковой системы: спектральной полосой фотоотклика, поглощением света, временем жизни фотовозбужденных носителей зарядов [1]. Взаимообмен между атомами кремния и индия в нанокластерах Si_7In_6 в системе Si(100)4x3-In изменяет электронные и механические свойства нанокластеров, приводя к появлению нескольких устойчивых соединений. Это дает основание использовать образованные в результате управляемого взаимообмена атомов кластеры в качестве элементов памяти [2].

Микроминиатюризация электронных устройств - переход от технологических норм 90 нм, освоенных сегодня прогрессивными микроэлектронными фирмами, к 20…30 нм, прогнозируемым к 2012г., − сопровождается уменьшением длины каналов МДП-транзисторов. Это приводит к деградации ряда характеристик транзистора: возрастанию подпороговых токов утечки, росту туннелирования электронов через затворный оксид, уменьшению подвижности носителей в канале и другие [3]. Наиболее перспективным технологическим приемом улучшения параметров транзистора в настоящее время признано введение в область канала транзистора локальных механических микронапряжений с целью увеличения в канале подвижности носителей заряда [4,5].

Анализ современного состояния проблемы. Для увеличения подвижности «дырок» необходимо введение напряжения сжатия, а подвижности электронов – напряжения растяжения. Введенные в кремний напряжения приводят к деформации его кристаллической решетки, изменению энергетической структуры кристалла, перераспределению носителей заряда. При соответствующем выборе кристаллографической ориентации эффективная масса электронов и «дырок» при этом уменьшается. Это способствует большей подвижности и, следовательно, большему быстродействию транзистора [3]. В настоящее время усилия разработчиков сосредоточились не на улучшении характеристик транзисторов уменьшенных размеров, а на поиске новых материалов подложки (напряженный кремний, сплав «кремний-германий»), затвора (многослойный металл, легирование), диэлектриков (большая и малая диэлектрическая проницаемость) и т.д.

Характер межпримесных взаимодействий в кристалле во многом определяется химическими связями на поверхности соприкасающихся фаз матрицы и примесного скопления и зависит от структуры и величины внешних сил, воздействующих на примесные скопления. Вследствие различия размеров атомов разного сорта в объеме матрицы возникают упругие поля, которые приводят к взаимодействию между атомами матрицы и дефектами. Это взаимодействие будет дальнодействующим, со сложным характером кристаллографической анизотропии и будет инициировать диффузию примесных атомов.

Постановка задачи. Рассматривается поликристаллическое тело, состоящее из кристаллов, содержащих примесные атомы сорта k. Соответственно каждый кристалл сорта k будет обладать модулями упругости C^k_{ijmn} и прочностными характеристиками S^k_{ij}, которые определяются в системе координат, связанных с кристаллом (кристаллографические оси координат).

Каждый кристалл случайным образом располагается относительно системы координат, связанной со всем телом (лабораторной системы координат) [1].

Повороты кристаллографических координат кристалла типа k относительно лабораторной системы координат задаются направляющими косинусами ℓ^k_{ij}, имеющими случайный характер.

Основная часть. Случайные модули упругости кристаллита типа k в лабораторной системе координат задаются:

$$\theta^k_{ijmn} = C^k_{\alpha\beta\gamma\delta} \cdot \ell^k_{\alpha i} \cdot \ell^k_{\beta j} \cdot \ell^k_{\gamma m} \cdot \ell_{\delta n} \qquad (1)$$

В соотношении (1) и далее по повторяющимся греческим индексам производится суммирование от 1 до 3

Для поликристалла, содержащего N кристаллитов разного типа, модули упругости запишутся:

$$\theta_{ijmn} = \sum_{k=1}^{N} \theta^k_{ijmn} \cdot \lambda^k \ , \qquad (2)$$

где λ^k – случайная индикаторная функция [6].

В случае возникновения условий, обеспечивающих диффузию атомов сорта k, модули упругости можно записать в виде:

$$\theta_{ijmn} = \sum_{k=1}^{N} \theta^k_{ij\alpha\beta} \cdot [E_{\alpha\beta mn} - \int_o^t f_{\alpha\beta mn}(D^k . \xi_{pq,q}) dt] \cdot \lambda^k \ , \qquad (3)$$

где E_{ijmn} – единичный тензор четвертого ранга;

$f_{ijmn}(D^k, \xi_{pq,q})$ – случайная тензорная функция, которая зависит от коэффициентов диффузии D^k атомов сорта k в поле градиента микроструктурных напряжений $\xi_{pq,q}$;

t - длительность процесса;

$$\xi_{pq,q} = \frac{\partial \xi_{pq}}{\partial q} .$$

Для определения микроструктурных напряжений ставится статистическая задача микромеханики структурно-неоднородных тел с переменной структурой:

$$\xi_{i\alpha,\alpha} = 0 \ ; \qquad (4)$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k=1}^{N} \theta^k_{ij\alpha\beta} \cdot (E_{\alpha\beta\gamma\delta} - \psi^k_{\alpha\beta\gamma\delta}) \cdot \lambda^k \cdot \varepsilon_{\gamma\delta} \ ; \qquad (5)$$

$$\varepsilon_{ij} = 0{,}5(\chi_{i,j} + \chi_{j,i}) \ ; \qquad (6)$$

$$\chi_i \big|_{г} = U^{г}_i \ , \qquad (7)$$

где ε_{ij} – случайные микродеформации;

χ_i – случайные микроструктурные перемещения;

$U_i^г$ – перемещения на границе объемов первого порядка (макроперемещения);

$$\psi_{ijmn}^k = \int_o^t f_{ijmn}(D^k, \xi_{pq,q})\, dt .$$

Исключая из системы уравнений (4) последовательно ε_{ij} и ξ_{ij}, а так же вводя вариации

$$\overset{o}{\theta}{}^k_{ijmnm} = \theta_{ijmn} - < \theta_{ijmn} >,$$

$$\overset{o}{\chi}_i = \chi_i - < \chi_i >,$$

получают

$$C_{i\alpha\beta j} \cdot \overset{o}{\chi}_{\beta,\alpha j} = -\Pi_{i\alpha,\alpha}, \qquad (8)$$

где

$$C_{ijmn} = \sum_{\alpha=1}^{N} [< \theta_{ijmn}^k > (E_{\alpha\beta mn} - < \psi_{\alpha\beta mn}^k >) < \lambda^k >];$$

$$\Pi_{ij} = C_{ij\beta\gamma} \cdot U_{\beta,\gamma} + \overset{o}{\theta}_{ij\beta\gamma} \cdot (U_{\beta,\gamma} + \overset{o}{\chi}_{\beta,\gamma}) \;;$$

$$U_i = < \chi_i > .$$

Решение задачи (8) при ограничениях [6] запишется в виде:

$$\overset{o}{\chi}_i(\vec{r}) = \int_V G_{i\beta}(\vec{r},\vec{r}\,') \cdot \Pi_{\beta\alpha,\alpha'} \cdot (\vec{r}\,')\, dV' \;, \qquad (9)$$

где $G_{ij}(\vec{r},\vec{r}\,')$ − тензор Грина, который определяют соотношениями [7].

Используя геометрические соотношения (6) из системы уравнений (8) и решение (9), получают решение для пульсаций микродеформаций:

$$\overset{o}{\varepsilon}_{ij} = \Phi_{ij\alpha\beta} \cdot e_{\alpha\beta}, \qquad (10)$$

где $e_{ij} =< \varepsilon_{ij} >$ - макроскопические деформации;

$$\Phi_{ijmn} = 0{,}5(\rho_{imn,j} + \rho_{jmn.i}) \;;$$

$$\rho_{imn} = \sum_{s=1}^{\infty} \rho_{imn}^{(s)} .$$

В корреляционном приближении решение (10) будет иметь вид:

$$\overset{o}{\varepsilon}_{ij} = \overset{o}{\theta}_{ij\alpha\beta} \cdot I_{\alpha\beta\gamma\delta} \cdot e_{\gamma\delta}, \qquad (11)$$

где I_{ijmn} − изотропный тензор, симметричный по индексам m, n и i, j [8]

С учетом выражения (11) и физических уравнений в системе (4) - (7) пульсации микронапряжений можно записать:

$$\overset{o}{\xi}_{ij} = \overset{o}{\theta}_{ij\alpha\beta}\cdot\overset{o}{\varepsilon}_{\alpha\beta} + \overset{o}{\theta}_{ij\alpha\beta}\cdot e_{\alpha\beta} + <\theta_{ij\alpha\beta}>\cdot\overset{o}{\varepsilon}_{\alpha\beta} + <\overset{o}{\theta}_{ij\alpha\beta}\cdot\overset{o}{\varepsilon}_{\alpha\beta}> \qquad (12)$$

Центральные моменты второго порядка распределения микронапряжений могут быть представлены как:

$$H_{ij}^{mn} = <\overset{o}{\xi}_{ij}\cdot\overset{o}{\xi}_{mn}> \qquad (13)$$

С учетом соотношений [9] условные моменты распределения микронапряжений в кристалле типа k , можно записать:

$$<\xi_{ij}^{k}> = <\xi_{ij}> + <\lambda^{k}>^{-1}<\overset{o}{\lambda}{}^{k}\cdot\overset{o}{\xi}_{ij}>\ , \qquad (14)$$

$$H_{ij}^{mn(k)} = <\overset{o}{\xi}{}^{k}_{ij}\cdot\overset{o}{\xi}{}^{k}_{mn}> = H_{ij}^{mn} - <\xi_{ij}^{k}><\xi_{mn}> - <\xi_{ij}><\xi_{mn}^{k}> - <\lambda^{k}>^{-1}\cdot[<\overset{o}{\lambda}{}^{k}\cdot\overset{o}{\xi}_{ij}\cdot\overset{o}{\xi}_{mn}>] +$$

$$+ <\xi_{mn}><\overset{o}{\lambda}{}^{k}\cdot\overset{o}{\xi}_{ij}> + <\xi_{ij}><\overset{o}{\lambda}{}^{k}\cdot\overset{o}{\xi}_{mn}>, \qquad (15)$$

где $<\xi_{ij}^{k}>$ - средние значения микронапряжений в кристалле типа k ;

$<\xi_{ij}>$ - макроскопические напряжения;

$$\overset{o}{\lambda}{}^{k} = \lambda^{k} - <\lambda^{k}>.$$

Решения (13) - (15) задают параметры распределения случайных безусловных и условных напряжений в микроструктурных материалах, подвергнутых макроскопическому деформированию величиной e_{ij} .

В соотношениях (1) направляющие косинусы имеют девять компонентов:

$$\ell_{ij} = \cos(x_i', x_j)\ , \qquad (16)$$

где x_i', x_j - кристаллографическая и лабораторная система координат соответственно.

Из девяти компонентов направляющих косинусов только три являются независимыми. Вводя три угла Эйлера φ, ψ и γ, направляющие косинусы будут иметь вид, представленный в работе [6].

Для поликристаллических квазиизотропных материалов направления кристаллографических осей координат являются равновероятными, и плотность распределения углов Эйлера будет иметь вид:

$$f(\varphi,\psi,\gamma) = \frac{1}{8\pi^2}\cdot\sin\gamma\,. \qquad (17)$$

В случае текстуры вращения одна из осей кристаллографической системы координат для всех кристаллов совпадает с лабораторной системой координат, а две другие равномерно распределены в плоскости изотропии. Направляющие косинусы для этого случая будут иметь вид:

$$\ell_{11} = \cos\varphi;$$

$$\ell_{12} = -\sin\varphi;$$

$$\ell_{21} = \sin\varphi; \tag{18}$$

$$\ell_{22} = \cos\varphi;$$

$$\ell_{33} = 1;$$

$$\ell_{31} = \ell_{32} = \ell_{23} = \ell_{32} = 0.$$

Совместная плотность распределения углов Эйлера для системы уравнений (18) будет:

$$f(\varphi,\psi,\gamma) = f(\varphi) = \frac{1}{2\pi}. \tag{19}$$

Для других видов текстуры, в том числе и для монокристаллов можно рассчитать соотношения типа (15) с соответствующим заданием случайных или детерминированных значений углов Эйлера. Некоторые подходы к построению совместных плоскостей распределения углов Эйлера для металлов с различными текстурами, изложенными в работе [10].

В представлении (3) тензорная функция $f_{ijmn}(D^k, \xi_{pq,q})$ может быть задана в виде:

$$f_{ijmn} = F_1(D^k, \xi_{pp,p}) \cdot \delta_{ij} \cdot \delta_{mn} + F_2(D^k, \xi_{pq,q}) \cdot (\delta_{im} \cdot \delta_{jn} - \delta_{in} \cdot \delta_{jm}) \tag{20}$$

где F_1 – случайная функция, зависящая от диффузии атомов типа k в направлении лабораторной координаты p от действия градиента нормальных напряжений по координате p;

F_2 – случайная функция, зависящая от диффузии атомов типа k в направлении лабораторной координаты q от действия градиента касательных напряжений по координате q;

δ_{ij} – символы Кронекера.

Выводы. Модель диффузионного переноса в неоднородном поле макронапряжений, представленная в настоящей работе, может быть использована для оценки особенностей диффузионных процессов в дефектных кристаллах, при разработке технологий диффузии примесей в конкретные области кристалла либо их очистки от нежелательных примесей.

1. *Герасименко Н.Н.* Самоорганизованные наноразмерные структуры на поверхности и в объеме полупроводников / Н. Н. Герасименко, К. К. Джаманбалин, Н. А. Медетов/ - Алматы: Изд-во «LEM», 2002. – 192 с.
2. *Саранин А.А.* Динамическое поведение нанокластеров In/Si на поверхности кремния / А. А. Саранин, А. В. Зотов, И. А. Куянов // Кремний – 2006. – Красноярск: Изд-во ИФ СО РАН, 2006. – С. 54.
3. *Неизвестный И.Г.* Нанотехнологии в полупроводниковых сенсорах / И. Г. Неизвестный // Кремний – 2009. – Новосибирск: Изд-во ИНХ СО РАН, 2009. – С. 117.
4. *Schimizu A.* et al. Local mechanical-stress control (LMC). New technique for CMOS-performance enhancement // IEDM-2000. – P. 19.41-19.44.
5. *Ito S.* et al. Mechanical stress effect of etch-stop nitride and its impact on deep submicron transistor design // IEDM – 2000. – P. 247-250.
6. *Богачев И.Н.* Введение в статистическое металловедение / И. Н. Богачев, А. А. Вайнштейн, Г. Д. Волков. - М.: Металлургия, 1972. – 216с.
7. *Лифшиц И.М.* О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упруго-анизотропной среды / И. М. Лифшиц, Л. Н. Розенцвейг // Журнал экспериментальной и технической физики. – 1947. – Т. 17. – Вып. 9, – С. 783-791.
8. *Соколкин Ю.В.* О постановке статистических краевых задач / Ю. В. Соколкин, М. Г. Танкеева, В. Г. Фрейнд // Механика полимеров и систем. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1974. – С. 3-23.
9. *Волков С.Д.* Статистическая механика композитных материалов / Волков С. Д., Ставров В. П. – Минск: БГУ, 1978. – 218 с.
10. *Адамеску Р.А.* Анизотропия физических свойств металлов / Р. А. Адамеску, П. В. Гельд, Е. А. Митюшов.

Стаття надійшла до редакції 26.04.2013.