

# 几种适用于 VLSI 离子注入新工艺的 模型研究

牛国富 阮刚

(复旦大学微电子学研究所, 上海, 200433)

(中国科学院上海冶金研究所离子束开放实验室, 上海, 200050)

1991年12月4日收到

本文采用能较精确模拟沟道效应的两个 Pearson-IV 分布的线性组合来模拟硅中 B 注入分布, 提出了一个基于剂量匹配求解等效厚度的两层结构注入分布修正射程表达式, 用该式对 B 注入  $\text{MoSi}_2/\text{Si}$ 、 $\text{CoSi}_2/\text{Si}$ , P 注入  $\text{CoSi}_2/\text{Si}$  进行了模拟和验证, 本文还给出了利用等效厚度概念导出的多层结构注入修正射程递推表达式, 并以 Poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si 三层结构为例进行了验证。

EEACC: 2550B, 2550

## 一、引言

随着 VLSI 技术的迅速发展, 离子注入在 IC 制造中的应用已大大扩展, 现有工艺模拟器中所用的离子注入模型已不能满足先进 IC 工艺模拟的要求。例如, 为减轻对硅衬底的沾污或调整注入分布, 离子注入通常通过一定的掩蔽层进行, 所以被注入的衬底往往是双层或多层的。又如, 为形成小尺寸 MOSFETs 中的浅结, 离子注入常通过硅化物进行。但目前还缺乏适用于工艺模拟的较精确的注入双层或多层结构的模型及通过硅化物注入的模型。发展适用于模拟这些实际工艺的离子注入模型, 无疑对 VLSI 电路中小尺寸有源器件工艺优化设计、发展精确的二维离子注入工艺模型和模拟均有重要意义。

典型的 IC 工艺模拟器, 如 SUPREM-3, 对离子注入  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  双层结构的处理, 采用修正射程的办法<sup>[1]</sup>。鉴于无掩蔽层时注入模型的精度将从根本上影响修正射程以后分布的精度, 为了改进考虑了离子注入沟道效应后 B 注入分布模拟的精度, 我们根据 Tasch 等最近报道的有关 B 注入分布的测量结果<sup>[2]</sup>, 采用了一个能更有效描述沟道效应的 B 注入分布模型。对于双层结构, 我们用等效厚度概念来衡量不同材料阻挡本领的不同, 得到了较精确的修正射程的表达式, 并用此表达式对离子注入  $\text{CoSi}_2/\text{Si}$ 、 $\text{MoSi}_2/\text{Si}$  进行了模拟和实验验证。对离子注入多层结构, 如 Poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si, Amaratunga 曾采用数值积分进行剂量匹配<sup>[3]</sup>, 靠多次迭代解得等效厚度, 由此得到注入分布。该法求解复杂, 且采用数值方法, 需多次迭代方能完成, 不适用于工艺模拟。本文在双层结构修正射程表达式的基础上, 递推了一个多层结构修正射程的解析表达式, 既简单又不失精度, 非常适用于工艺模拟。

以下依次叙述改进的 B 注入模型、双层结构注入模型、硅化物/硅注入分布模拟和验证及多层结构注入模型。

## 二、改进的 B 注入模型

在 SUPREM-3 中, 为模拟 B 注入沟道效应, 采用了一个基于经验修改的 Pearson-IV 分布函数。这种分布是在标准的 Pearson-IV 分布上附加一个指数拖尾修正, 取一个同掺杂剂能量、剂量无关的固定特征长度  $0.045\mu\text{m}^{[1]}$ 。这种方法能较好描述能量较低 (30—100keV)、剂量较小时 B 注入分布。实际上能量、剂量的增加将引起衬底无序损伤的加重, 减弱沟道效应, 因此较大能量和较高剂量情况下该修正与实际情况有较大偏离。

随着 SIMS 技术低浓度探测极限的提高, Tasch 等对 B 注入分布进行了测量, 发现 B 注入分布的形状随不同能量、剂量有较大变化, 随能量、剂量的增加沟道效应减弱; 他们还提出了一个采用两个 Pearson-IV 分布的线性组合来描述其分布的模型<sup>[2]</sup>。为了改进工艺模拟器中 B 注入模型的精度, 在 Tasch 等的实验结果基础上, 我们采用统计方法, 由实验结果拟合两个 Pearson-IV 分布参数与能量、剂量的关系, 使之能够真正用于工艺模拟。

Pearson-IV 分布函数形式为

$$f(x) = K \cdot [b_2 \cdot (x - R_p)^2 + b_1 \cdot (x - R_p) + b_0] \cdot \exp \left[ \frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_2 \cdot b_0 - b_1^2}} \cdot \arctan \frac{2b_2 \cdot (x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2 \cdot b_0 - b_1^2}} \right]. \quad (1)$$

$K$  由剂量归一化确定;  $a, b_0, b_1, b_2$  分别为:

$$\begin{aligned} a &= -\frac{\sigma \cdot \gamma \cdot (\beta + 3)}{A} & b_0 &= -\frac{\sigma^2 \cdot (4\beta - 3\gamma^2)}{A} \\ b_1 &= a & b_2 &= -\frac{(2\beta - 3\gamma - 6)}{A} \end{aligned}$$

其中  $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$ ,  $R_p, \sigma, \beta, \gamma$  分别为平均投影射程, 标准偏差, 归一化峰态, 归一化偏差。

我们采用

$$f(x) = g_1 f_1(x) + g_2 f_2(x), \quad (2)$$

来描述 B 注入分布。

$f_1(x), f_2(x)$  分别为描述非晶散射和沟道效应部分的两个 Pearson-IV 分布函数,  $g_1$  为非晶散射部分的权重因子,  $g_2$  为沟道效应部分权重因子,  $f_1(x), f_2(x)$  分别由参量  $R_{p1}, \sigma_1, \beta_1, \gamma_1$  和  $R_{p2}, \sigma_2, \beta_2, \gamma_2$  描述, 他们仅与注入能量有关,  $g_1, g_2$  满足

$$g_1 + g_2 = 1. \quad (3)$$

$g_1, g_2$  由能量、剂量共同决定, 能量越高, 剂量越大, 注入离子对衬底造成的无序损伤越严重, 分布的随机散射部分权重  $g_1$  就越大, 相应的,  $g_2$  就减小。

对于  $R_{p1}, \sigma_1, \beta_1, \gamma_1$  和  $R_{p2}, \sigma_2, \beta_2, \gamma_2$ , 我们均采用多项式拟合办法将他们表示成相应的能量的多项式。若用  $C$  代表以上 8 个参数中任意一个, 用  $E$  表示注入能量, 则有

$$C = \sum_{i=0}^4 C_i E^i. \quad (4)$$

不同  $C$  时的  $C_i$  值见表 1 所示。 $E$  的单位为 keV,  $R_{p1}, \sigma_1, R_{p2}, \sigma_2$ , 单位为  $\text{Å}$ 。

表 1 B 注入分布模型参数同能量关系表达式中系数值

参量	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$
$R_{p1}$	150.68	34.30	-0.053	0	0
$\sigma_1$	48.06	19.31	-0.20	$1.0 \times 10^{-3}$	0
$\beta_1$	2.51	-0.19	$4.6 \times 10^{-3}$	$-5.0 \times 10^{-3}$	$2.0 \times 10^{-3}$
$r_1$	3.50	0	0	0	0
$R_{p2}$	287.79	60.09	-0.15	0	0
$\sigma_2$	314.49	22.74	-0.38	$2.3 \times 10^{-3}$	0
$\beta_2$	0	0	0	0	0
$r_2$	2.58	$1.6 \times 10^{-2}$	$-1.2 \times 10^{-4}$	0	0

$g_1$  为能量  $E$  和剂量  $D$  的函数, 根据实验结果拟合, 采用以下表示式

$$\begin{aligned} g_1 &= A(E) \ln(D) + B(E) \\ A(E) &= 4.05 \times 10^{-2} \exp(-3.08 \times 10^{-2}E) \\ B(E) &= -5.14 \times 10^{-1} + 4.10 \times 10^{-2}E - 3.49 \times 10^{-4}E^2. \end{aligned} \quad (5)$$

$E$  单位仍为 keV,  $D$  单位为  $\text{cm}^{-2}$ 。

图 1 给出了  $B(E = 35\text{keV}, D = 1 \times 10^{14}\text{cm}^{-2})$  注入的 SIMS 测量结果 [2] 与 SUPREM-3 模拟结果和本模型模拟结果的比较。可以看出采用两个 Pearson-IV 分布线性组合能较好描述 B 的沟道效应。

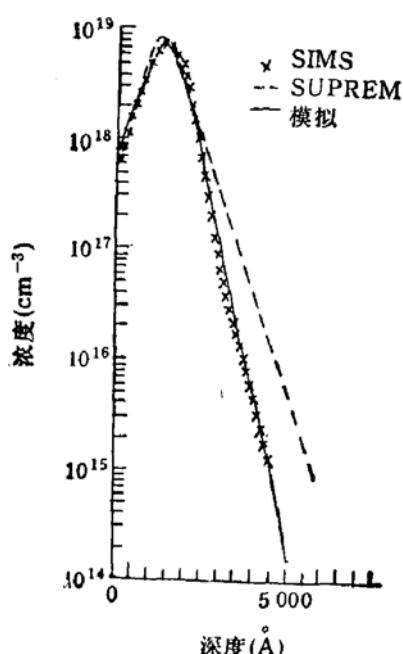


图 1  $B(35\text{keV}, 1 \times 10^{14}\text{cm}^{-2})$  注入分布的 SIMS 测量、 SUPREM-3、本模型模拟比较

### 三、双层结构注入模型

我们采用射程修正的办法来得到双层结构中的注入分布。

为了简化修正射程表达式，我们假设对于  $i(i=1, 2, 3 \dots n)$  层材料中任一单独材料中的离子注入分布  $f_i(x)$  均采用高斯分布来描述：

$$f_i(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \cdot \exp \left[ -\frac{(x - R_{p_i})^2}{2\sigma_i^2} \right]. \quad (6)$$

$R_{p_i}, \sigma_i$  分别为材料  $i$  中的射程和标准偏差。

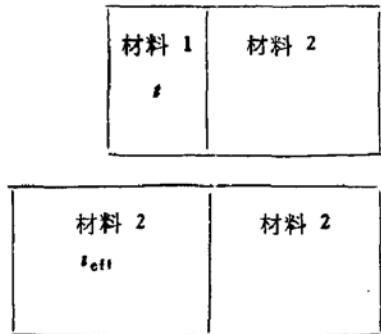


图 2 双层结构示意图

以双层结构（图 2）为例， $t$  代表掩蔽层厚度， $t_{eff}$  代表等效于掩蔽层的衬底厚度， $N_1$  代表第一层（掩蔽层）材料背散射的离子数与阻止在厚度为  $t$  的掩蔽材料中离子数之和， $N_2$  代表第二层（衬底）材料背散射的离子数与阻止在厚度为  $t_{eff}$  的衬底材料中离子数之和。

$$N_1 = \int_{-\infty}^{t_{eff}} f_1(x) dx. \quad (7)$$

$$N_2 = \int_{-\infty}^{t_{eff}} f_2(x) dx. \quad (8)$$

令  $N_1 = N_2$ ，经过简单的数学推导，得到  $t_{eff}$  表达式：

$$t_{eff} = R_{p2} + (t - R_{p1}) \cdot \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \quad (9)$$

这样，在双层结构中第一层 ( $x < t$ ) 和第二层 ( $x > t$ ) 中离子分布分别为  $f_1(x)$  及  $f_2(x')$  其中

$$x' = x - t + t_{eff}. \quad (10)$$

若引入修正射程  $R_{p2'}$  来表示  $f_2(x')$  则有：

$$R_{p2'} = t \cdot \left( 1 - \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) + R_{p1} \cdot \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \quad (11)$$

对于  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  双层结构离子注入，Ryssel 引进了一个平移密度变换来修正射程，其修正值  $dx = R_{p2'} - R_{p2}$  的表达式为  $dx = t(1 - \sigma_2/\sigma_1)^{[4]}$ 。而在 SUPREM-3 中，采用了以下近似表达式  $dx = t(1 - R_{p2}/R_{p1})^{[1]}$ 。本模型得出的修正值为：

$$dx = t \cdot \left( 1 - \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) + R_{p1} \cdot \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \quad (12)$$

同  $t$  无关的项是由于我们在(2)、(3)中计人了  $N_{bi}$  的贡献

$$N_{bi} = \int_{-\infty}^0 f_i(x) dx \quad (13)$$

也即考虑了该种材料背散射离子数  $N_{bi}$  的结果 [4]，显然  $N_{bi}$  是与该材料的厚度  $t_i$  无关的常量。

当  $t$  趋于零时, 两种材料变为一种材料, 则有  $R_{p1} = R_{p2}, \sigma_1 = \sigma_2, dx = 0$ . 此外当条件  $R_{p2}/R_{p1} = \sigma_2/\sigma_1$  成立时, 我们的模型就可退化成 Ryssel 或 SUPREM-3 的模型.

虽然, 对于  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  结构, 注入离子为 B、P、As、Sb 时,  $R_{p2}/R_{p1} = \sigma_2/\sigma_1$  基本满足. 我们的模型同 Ryssel 及 SUPREM-3 中所用的模型得出的结果差别不大, 但使用我们的模型可以更精确地应用到  $R_{p2}/R_{p1} \neq \sigma_2/\sigma_1$  的双层结构, 同时可以较方便地得出一个多层次结构注入分布修正射程表达式. (见第五节)

前面已经提到, 无掩蔽层时注入分布的精度将从根本上影响修正射程以后分布的精度. 因此  $f_2(x)$  选取较为精确的形式, 对 P、As、Sb 我们采用 Pearson-IV 分布, 对 B 采用第二节中的分布模型.

#### 四、硅化物/硅结构中注入分布模拟和验证

随着 VLSI 技术的发展和器件尺寸的缩小, 硅化物作为接触和互连材料受到了广泛研究. 离子注入自对准硅化物 MOS 器件技术中为形成浅结和减轻注入造成衬底的损伤, 常通过硅化物进行注入. 为使工艺模拟满足 VLSI 技术发展的不断需要, 需要研究离子注入硅化物/硅结构分布模型.

我们用第二、三节中改进的 B 注入模型和双层结构注入模型对硅化物/硅结构注入分布进行了模拟. 硅化物中的射程、标准偏差均采用 Biersack 理论计算[5].

图 3 给出了 B 注入  $\text{MoSi}_2/\text{Si}$  ( $t = 1000\text{\AA}$ ,  $30\text{keV}$ ,  $7 \times 10^{15}\text{cm}^{-2}$ ) 模拟结果与二次离

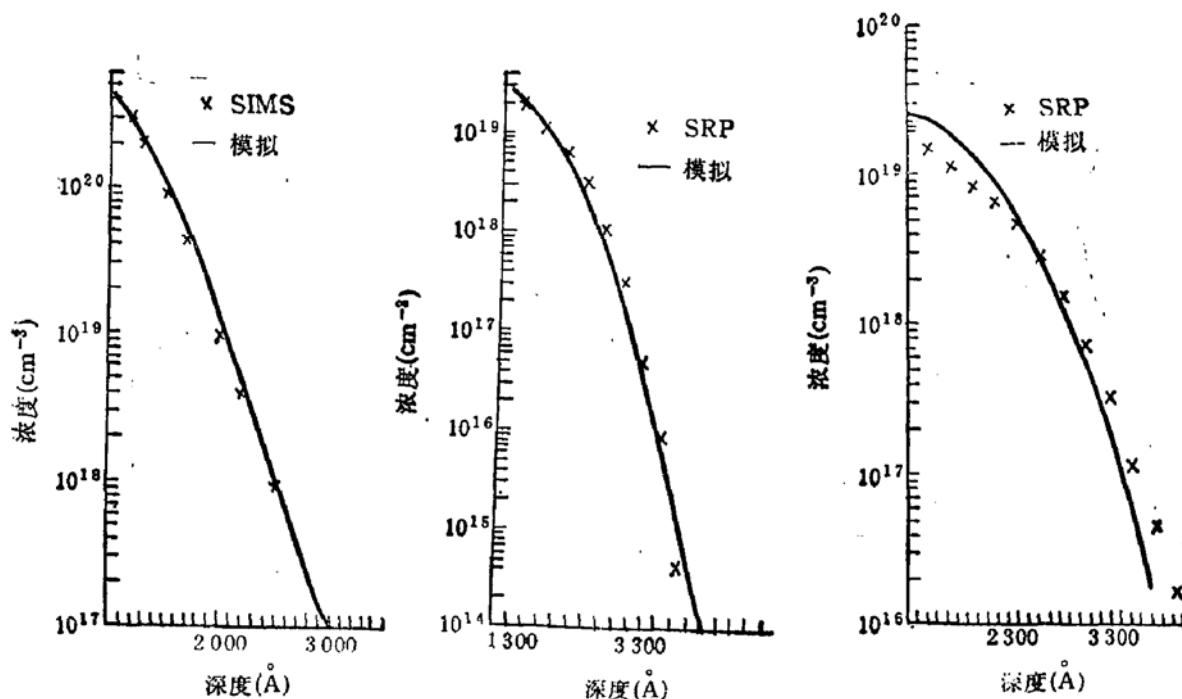


图 3 B 注入  $\text{MoSi}_2/\text{Si}$  ( $30\text{keV}$ ,  $7 \times 10^{15}\text{cm}^{-2}$ ) 模拟、SIMS 测量结果比较

图 4 B 注入  $\text{CoSi}_2/\text{Si}$  ( $50\text{keV}$ ,  $5 \times 10^{15}\text{cm}^{-2}$ ,  $850^\circ\text{C}$ ,  $10\text{min}$ ) 模拟、SRP 测量结果比较

图 5 P 注入  $\text{CoSi}_2/\text{Si}$  ( $160\text{keV}$ ,  $5 \times 10^{15}\text{cm}^{-2}$ ,  $850^\circ\text{C}$ ,  $1\text{min}$ ) 模拟、SRP 测量结果比较

子质谱(SIMS)测量结果的比较[6]。比较结果表明对于B注入 $\text{MoSi}_2/\text{Si}$ 结构,采用本模型可以较好地模拟其注入分布。

图4给出了B注入 $\text{CoSi}_2/\text{Si}$ ( $t = 1300 \text{ \AA}$ , 50keV,  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , 850°C, 10min)浅结工艺模拟结果与SRP数据的比较<sup>[7]</sup>。考虑到硼从 $\text{CoSi}_2$ 到Si的外扩散很小,退火温度较低, SRP数据可近似作为未退火时的注入分布来验证模拟的可靠性。

图5给出了P注入 $\text{CoSi}_2/\text{Si}$ ( $t = 1300 \text{ \AA}$ , 160keV,  $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , 850°C, 1min)浅结工艺模拟结果与SRP数据的比较<sup>[7]</sup>。可以明显观察到P的退火特征,注入分布与退火后分布之间存在扭曲效应<sup>[8]</sup>。

B、P注入 $\text{CoSi}_2/\text{Si}$ 的实验测量与模拟结果基本附合,说明本模型可以较好描述B、P注入 $\text{CoSi}_2/\text{Si}$ 分布。将硅化物中分布参数 $R_p, \sigma$ 以表格形式存放于程序内部,按照第三节中模型可以方便地模拟硅化物/硅结构中注入分布。

## 五、多层结构注入模型

应用第三节中双层结构注入模型推导方法,从第一层起将厚度为 $t_i$ 的第*i*层材料等效为第*i*+1层材料,直至第*n*-1层材料为止。多层结构如图6所示。同样地可以引入修正射程 $R_{p,n'}$ 代入 $f_n(x)$ 即可得到最终分布。

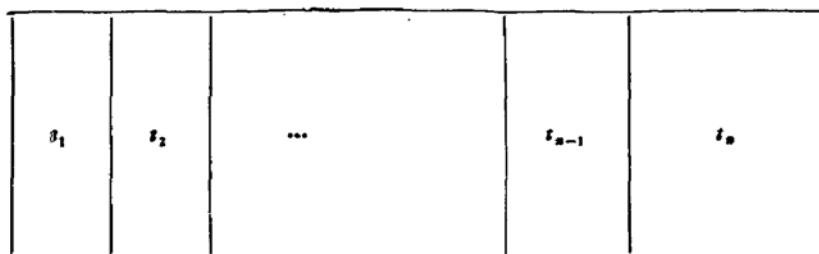


图6 多层结构示意图

用 $t_{\text{eff},n-1}$ 来表示前*n*-1层材料等效为第*n*-1层材料的厚度。第*n*-1层(厚度为 $t_{\text{eff},n-1}$ )与第*n*层构成双层结构。类似于(9)式

$$R_{p,n'} = t_{\text{eff},n-1} \cdot \left(1 - \frac{\sigma_n}{\sigma_{n-1}}\right) + R_{p,n-1} \cdot \frac{\sigma_n}{\sigma_{n-1}}. \quad (14)$$

显然 $t_{\text{eff},n-1}$ 应由两部分构成,一部分是第*n*-1层材料本身厚度 $t_{n-1}$ ,另一部分是前*n*-2层材料等效为第*n*-1层材料的厚度 $t_{\text{eff},n-1}'$ ,对照(8)式

$$t_{\text{eff},n-1}' = R_{p,n-1} + (t_{\text{eff},n-2} - R_{p,n-2}) \cdot \frac{\sigma_n}{\sigma_{n-1}}$$

即

$$t_{\text{eff},n-1} = t_{n-1} + (t_{\text{eff},n-2} - R_{p,n-2}) \cdot \frac{\sigma_n}{\sigma_{n-1}} + R_{p,n-1}. \quad (15)$$

递推下限

$$t_{\text{eff},1} = t_1. \quad (16)$$

MOS自对准工艺棚区为Poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si结构时进行源、漏As注入(160keV,  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , 950°C, 15min),用(14)、(15)、(16)式模拟其注入分布,并与Amaratunga

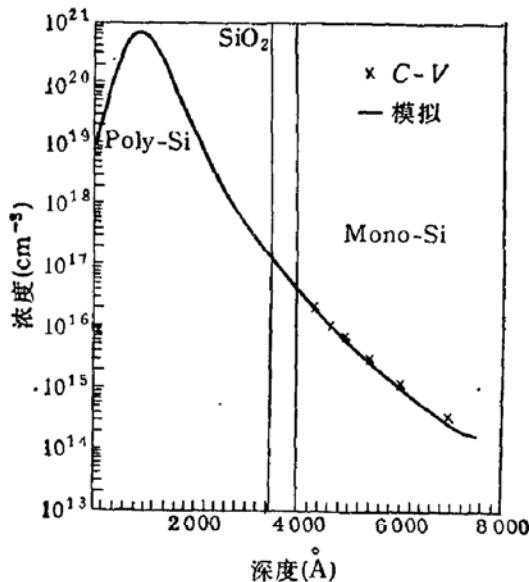


图 7 As 注入 Poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si(160keV,  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , 950°C, 15min)  
模拟、C-V 测量结果比较

的 C-V 测量进行了比较<sup>[3]</sup>。结果表明本模型能够较好地模拟多层结构注入分布(图 7)。Amaratunga 则是采用数值积分的方法从第一层起依次求等效厚度  $t_{\text{eff},1}, t_{\text{eff},2}, \dots, t_{\text{eff},n-1}$ 。本模型在剂量匹配时没有采用数值积分,而是用高斯分布形式使结果简化得到了一个递推表达式进行射程修正。对于 Pearson-IV 分布在归一化峰态较小时这种作法引入误差很小。对 B、P、As、Sb 归一化峰态均较小,因而引进误差较小,却带来了求解上的大大简化。虽然采用剂量匹配方法求解等效厚度并没有严格地从物理意义上考察注入离子与多层结构靶之间的散射过程,但这是一种对精度影响可忽略的情况下的合理简化方法。

## 六、结 论

本文考虑了 B 注入能量、剂量对沟道效应的影响,给出了各参数与 B 注入能量、剂量的关系式。采用了两个 Pearson-IV 分布线性组合模型,能较 SUPREM-3 中指数拖尾分布更为精确地模拟 B 在硅中的注入分布。用剂量匹配的方法求解等效厚度,得到了一个双层结构修正射程表达式,与 SUPREM-3、Ryssel 所采用的修正比较,具有更明确的物理意义,适用范围更普遍。在双层结构的基础上得到了一个多层结构修正射程解析式。利用双层结构修正射程表达式和改进的 B 注入模型对硅化物/硅结构中注入分布进行了模拟和验证,为硅化物自对准 MOS 器件的工艺优化设计提供了重要依据。多层结构修正射程递推式的可信度在 Poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si 结构上得到了验证。IC 制造工艺中高温热处理时间的缩短(如退火采用 RTA)使杂质再分布减少,但由于不同材料之间存在化学分凝,界面处再分布仍比较明显。对不同离子和掩蔽材料,其再分布机理差别较大,需要分别发展不同的退火模型来模拟杂质再分布。对 SiO<sub>2</sub>/Si 结构中 B、P、As、Sb 的再分布,已有较多研究成果,并应用与 SUPREM-3 中,对硅化物/硅结构中, B、P、As 的再分布

机理,目前国际上已有一定研究结果,进一步发展适用于工艺模拟的硅化物/硅结构中杂质退火模型将是一个需进一步研究的有意义的课题。

### 参 考 文 献

- [1] SUPREM-III Source Code. Version 8601, Standford University.
- [2] Al F. Tasch *et al.*, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 810(1990).
- [3] G. A. J. Amaratunga *et al.*, *IEEE, ED-32*, 1889(1985).
- [4] The Hague. Process and Device Simulation for MOS-VLSI circuits, 125—179, Martinus Nijhoff (1983).
- [5] J. P. Biersack, *Nucl. Inst & Methods* **182/183**, 199(1981).
- [6] R. Angelucci *et al.*, ESSDERC' 89, 238(1989).
- [7] 刘平,李炳宗等, Co<sub>x</sub>Si 固相反应和 CoSi<sub>x</sub> 薄膜特性,半导体学报,待发表.
- [8] S. M. Sze, VLSI Technology, McGraw-Hill Book Company, 1983.

## Studies of Models for Ion Implantation in Advanced VLSI Technology

Niu Guofu and Ruan Gang

(Microelectronics Institute, Fudan University, 200433)

(Ion Beam Laboratory, Shanghai Institute of Metallurgy, Academia sinica, Shanghai 200050)

### Abstract

A model using the sum of two Pearson-IV distributions is used to simulate channeling effect of B in Si more accurately. Parameters of this model are extracted from experiments by statistical method, which is suitable for practical IC process simulation. Based on the method of dose matching and idea of effective thickness, an expression of modified projected range for two-layer structure is given. The distributions of B in MoSi<sub>2</sub>/Si and CoSi<sub>2</sub>/Si and P in CoSi<sub>2</sub>/Si are simulated by the use of the expression and compared with experiments. Based on the same method as two-layer structure, an expression of modified projected range for multi-layer structure is given and applied to the modelling of As in Poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si. Good agreement with experiment is obtained.

EEACC: 2550B, 2550