

中性空位引起的本征扩散对硅中注入 砷离子在退火过程中再分布的影响

汤庭鳌 郑大卫

(复旦大学电子工程系, 上海)

C. A. Paz de Araujo

(University of Colorado at Colorado Springs, USA)

1989年8月10日收到

本文对硅中砷扩散系数考虑了中性空位引起的本征扩散项 D_i^0 的影响, 推导而得出 D_i^0 对表面浓度 N_s , 结深 $z_s(t)$ 等的影响大约为 5—10%。在离子注入退火的解析模型中考虑其影响是有实际意义的。

主题词 离子注入, 退火, 本征扩散, 解析模型

一、引言

在“离子注入退火过程中高浓度砷硼再分布扩散的一种新的解析模型”^[1]一文中, 作者对扩散系数 $D_{As}(N) = h \left[D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{N_i} \right) \right]$ (其中 $h = 1 + \frac{N}{2N_i} \left[\left(\frac{N}{2N_i} \right)^2 + 1 \right]^{-1/2}$) 曾作了近似, 即忽略了中性空位引起的本征扩散的影响, 认为 $D_{As}(N) \approx 2D_i^- \left(\frac{N}{N_i} \right) = D_i^- \left(\frac{N}{N_i} \right)$ 。这样的假设对于浓度不太高的情况, 会引进一定的误差。本文避免采用上述近似, 赘图通过解扩散方程, 考虑到中性空位引起的本征扩散的影响, 从而得到更为精确的结果。

二、理论分析

为了得到较精确的描述离子注入再分布的解析表达式, 必须求解扩散方程, 在扩散系数中应包含本征扩散项:

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right] \quad (1)$$

式中与浓度有关的扩散系数 D 主要由带单电荷空位与杂质相互作用及中性空位本征扩散所决定, 即有:

$$D = \left[2D_i^0 + \frac{2D_i^-}{N_i} N \right] = 2D_i^0 + KN \quad (2)$$

$$K = 2D_i^- / N_i \quad (3)$$

K 是一个特征参数，它的值与杂质种类及温度有关，其量纲为 $[\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$ 。对于硅中砷注入， K 由下式给出^④

$$K_{AS} = \frac{45.8 \times e^{-4.1/kT}}{N_i} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1} \quad (4)$$

式中 k 为 Boltzmann 常数， T 为绝对温度， N_i 为扩散温度下的本征载流子浓度。

$$\text{令 } K\theta(x, t) = 2D_i^0 + KN \quad (5)$$

代入方程(1)，可得 $\theta(x, t)$ ，满足的方程式：

$$\frac{\partial \theta(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K\theta(x, t) \frac{\partial \theta(x, t)}{\partial x} \right] \quad (6)$$

由文献[1], [2]可知方程(6)的解为：

$$\theta_1(x, t) = f(t) \left[F(0) - \frac{K'}{2} x^2 f^2(t) \right] \quad (x \leq x_p) \quad (7)$$

$$\theta_2(x, t) = f(t) \left[F(\eta_p) - \frac{K'}{2} (x^2 - x_p^2) f^2(t) \right] \quad (x \geq x_p) \quad (8)$$

$$f(t) = \frac{f(0)}{\alpha} = \frac{f(0)}{[1 + 3KK'f^3(0)t]^{1/3}} \quad (9)$$

$$\eta_p = x_p \cdot f(t) \quad (10)$$

$x_p(t)$ 为峰值浓度位置， $f(0)F(0)$ 为表面杂质浓度。

假定在退火开始时， $0 \sim x_p$ 之间的杂质分布是高斯分布函数，并利用 x_p 处两段函数值应该连续的性质，可以得到杂质分布函数为：

$$N_1(x, t) = \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\Phi}{\sqrt{2\pi \Delta R_p}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{x - R_p}{\Delta R_p} \right)^2 \right\} - \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1 \right) \frac{K_1}{2} x^2 + \frac{2D_i^0}{K} \right] - \frac{2D_i^0}{K} \quad (x \leq x_p) \quad (11)$$

$$N_2(x, t) = \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\Phi}{\sqrt{2\pi \Delta R_p}} - \frac{1}{2} \frac{K_1}{\alpha^2} (x^2 - x_p^2) \right] - \frac{2D_i^0}{K} \quad (x \geq x_p) \quad (12)$$

三、结果比较与讨论

1. 峰值浓度位置 $x_p(t)$

$x_p(t)$ 由极值条件 $\frac{dN_1}{dx} = 0$ 决定。由(1)式得到：

$$x_p(t) = \frac{N_{p0}R_p}{\Delta R_p^2} \left[\frac{N_{p0}}{\Delta R_p^2} + \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1 \right) K_1 \right]^{-1}, \text{ 其中 } K_1 = K'f^3(0)$$

为与注入条件有关的参量，其量纲为 $[\text{cm}^{-5}]$ 。 K' 为分离变量时引入的常数。 N_{p0} 为初始峰值浓度。由 $x_p(t)$ 的表达式可见 D_i^0 并不影响峰值浓度的位置。

2. 随时间变化的结深 $x_j(t)$

在衬底浓度 N_B 不太大的情况下，可由(12)式 $N_2(x_j, t) = N_B$ 求得结深的表达式。

$$x_i(t) = \left\{ \frac{2\alpha^2}{K_1} \left[N_{p0} - \alpha \left(N_{p0} + \frac{2D_i^0}{K} \right) \right] \right\}^{1/2} \quad (13)$$

与文献[1]中的 $x_i(t) = \left(\frac{2N_{p0}}{K_1} \right)^{1/2} [1 + 3KK_1t]^{1/3}$ 相比, 可见在相同条件下, 考虑到本征扩散系数后结深减小, 这是因为考虑中性空位本征扩散影响时, 扩散前峰浓度减小所致。图 1 给出在退火温度分别为 900°C, 950°C, 1000°C 时, 结深与退火时间关系的比较。图中虚线表示忽略中性空位本征扩散情况, 实线表示计及中性空位本征扩散后的结果。表 1 给出不同温度下的 D_i^0 , K 以及 K_1 值。砷注入的能量和剂量分别为 80 keV 及 $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ 。

表 1

$T(\text{°C})$	900	950	1000
$D_i^0(\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	1.330×10^{-15}	5.298×10^{-15}	1.903×10^{-14}
$K(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	1.165×10^{-25}	3.650×10^{-24}	1.646×10^{-24}
$K_1(\text{cm}^{-3})$		1.894×10^{34}	

其中 K_1 由初始结深确定, D_i^0 由下式确定:

$$D_i^0 = 0.66 \exp(-3.44 \text{ eV}/kT) \quad (14)$$

其来源可参阅文献[3]。

图 2 给出理论计算值与用 SIMS 实测值的比较。退火温度为 950°C。图内中心线表示实验结果^[1]。由图可知本文考虑中性空位本征扩散后, 其结果比[1]文与实验符合得更好。

3. 表面浓度随时间的变化 $N_s(t)$

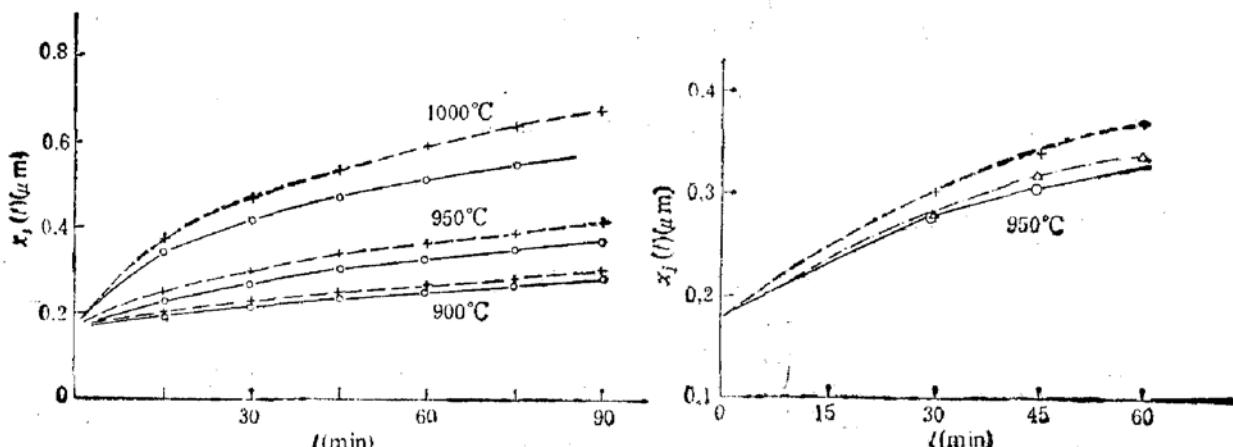


图 1 结深随退火时间变化图

---忽略中性空位本征扩散
—考虑中性空位本征扩散

图 2 结深与退火时间关系比较

—·—·—实验结果
---忽略中性空位本征扩散
——考虑中性空位本征扩散

由(11)式可得初始时($t = 0$)的表面浓度为

$$N_{s0} = N_s(0, 0) = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi \Delta R_p}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{R_p}{\Delta R_p} \right)^2 \right] \quad (15)$$

而 $N_s(t)$ 为

$$N_s(t) = N_s(0, t) = \frac{1}{\alpha} N_{s0} + \frac{2D_i^0}{K} \left(\frac{1}{\alpha} - 1 \right) \quad (16)$$

其中 $\frac{2D_i^0}{K} \left(\frac{1}{\alpha} - 1 \right)$ 表示由于中性空位引起之本征扩散使表面浓度减小。

参 考 文 献

- [1] 汤庭鳌, Carlos. Araujo, 半导体学报, 8, 160(1987).
- [2] M. Chezzo, J. Electrochem. Soc., 120, 1123(1973).
- [3] Charles P. Ho, James D. Plummer, Stephen E. Hansen, Robert W. Dutton, IEEE Trans. on Electron Devices, ED-30, 1418(1983).

Influence of Intrinsic Diffusion Caused by Neutral Vacancy on Arsenic Ion Redistribution during Annealing

Tang Tingao Zhieng Dawei

(Dept. of E. E., FUDAN University Shanghai, China)

C. A. Paz de Araujo

(University of Colorado at Colorado Springs, U. S. A.)

Abstract

The influence of the intrinsic diffusion D_i^0 caused by neutral vacancy on arsenic diffusion coefficient is considered. It causes about 5—10% correction to the surface concentration N_s , junction depth $X_j(t)$, etc. It is meaningful to include the influence of D_i^0 in the analytical model for ion implantation annealing.

Key words Ion implantation, Annealing, Intrinsic diffusion Analytical model

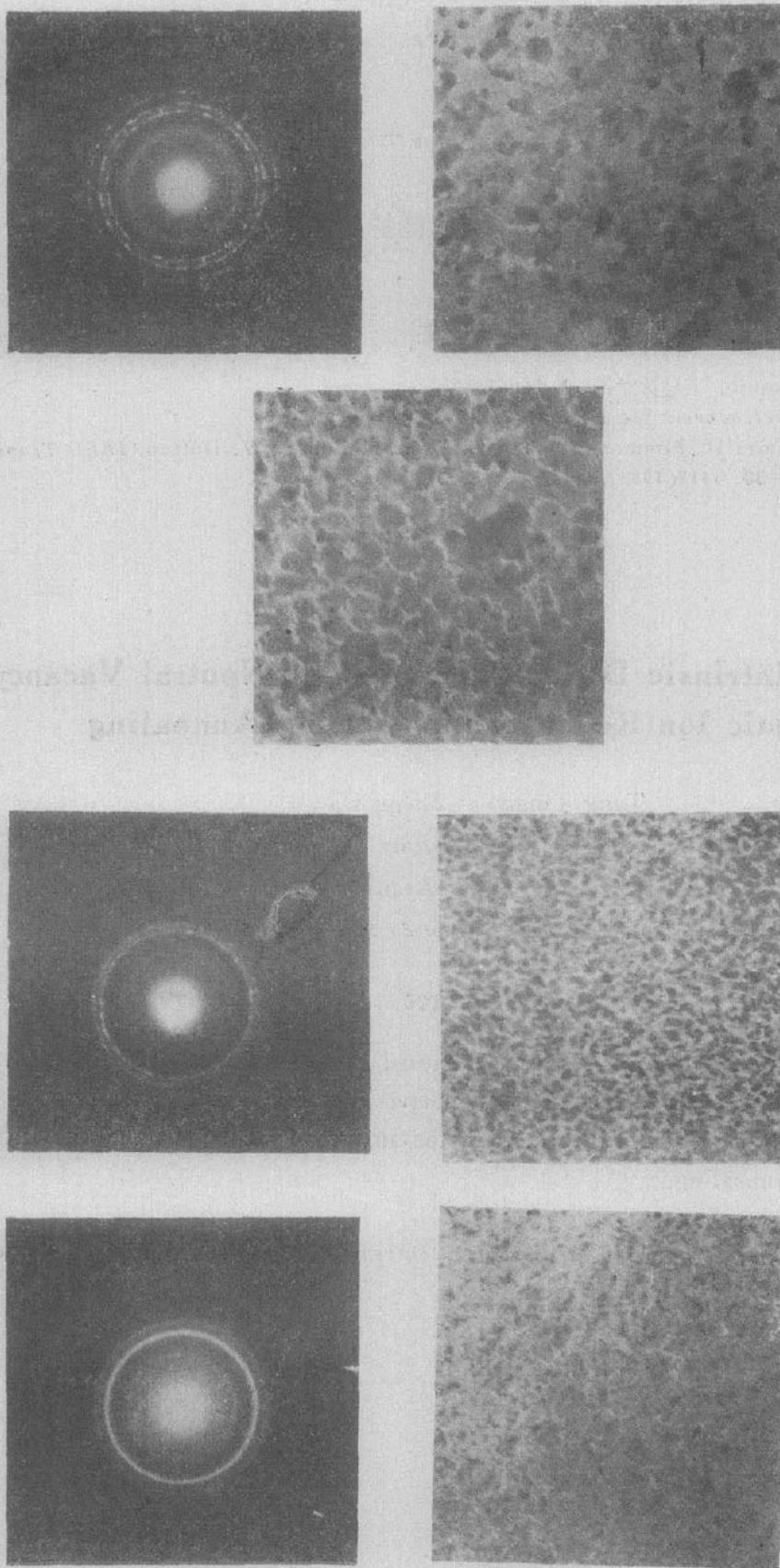


图 3 Pd/a-Si:H 界面反应的 TEM 实验结果,包括电子衍射图(上)和形貌像(下)