

# 注入氧形成的 SOI 结构中氧分布的模拟\*

阮 刚 徐 晨 曜 俞 强

(复旦大学微电子学研究所, 上海)

1988年4月11日收到

我们提出了一个用于模拟 SIMOX 注入分布的经验公式, 用此公式对某些氧注入分布进行了模拟, 其结果与有关理论计算及实验值相比符合较好。我们的经验公式既有一定精度又形式简单, 非常适合于作为 VLSI 全工艺模拟器中的一部份。

**主题词:** SIMOX 技术, 氧注入, 注入分布, 工艺模拟

## 一、引言

SOI 结构是八十年代开始迅速发展起来的一种用于制造 VLSI 的新型衬底结构。这种结构能很好地实现垂直隔离, 因而能大大提高元件密度、减小寄生电容及完全消除闩锁。用离子注入高剂量氧, 在硅中生成一富氧层, 再通过高温退火形成绝缘隔离层  $\text{SiO}_2$  的所谓 SIMOX (Separation by IMplanted OXygen) 方法是实现 SOI 结构的一种很有特色的方法。用此法形成的  $\text{SiO}_2$  同 Si 具有较好的界面及电学特性, 因此高剂量氧在 Si 中注入的研究及用氧注入形成高质量 SOI 结构的研究已愈来愈多地受到人们的重视。

随着 SOI 结构研究的不断发展, SIMOX 方法亦得到了很大的发展, 并已开始实用, 因此, 氧注入形成的 SOI 结构中氧分布的模拟研究已成为 VLSI 工艺模拟研究中的一个很有意义的研究课题。1981 年日本 Hayashi 等人<sup>[1]</sup>考虑了氧和硅的化学键作用, 但仍利用 LSS 理论来描述硅中高剂量氧注入的分布, 由于 LSS 理论只适用于描述单质中的注入分布, 而在大剂量注入下, 靶不能再被看作是单质的, 因此用 LSS 理论得出的计算结果不能令人满意。1984 年英国的 Maydell-Ondrusz<sup>[2]</sup> 和 Jäger<sup>[3]</sup> 等人分别提出了二种模拟氧注入的方法。Maydell-Ondrusz 是在实验数据的基础上利用有限元法, 通过不断修正注入射程的大小及表面的位置移动来最终实现总体上的分布模拟。而 Jäger 则从描述氧的输运方程和连续性方程出发, 通过解偏微分方程来得到各位置点的氧分布值。可见 Maydell-Ondrusz 注重氧的总体分布而 Jäger 则侧重于氧原子在 Si 中的输运, 并由于这一特点, 他们的计算结果与  $^{18}\text{O}^+$  示踪法实验<sup>[4]</sup> 结果比较, 各有符合之处及不足。Maydell-Ondrusz 计算结果与  $^{16}\text{O}^+ + ^{18}\text{O}^+$  的总分布符合较好; 但对单独  $^{18}\text{O}^+$  的分布偏离较大。而 Jäger 的计算结果与  $^{18}\text{O}^+$  的分布很接近, 但与  $^{16}\text{O}^+ + ^{18}\text{O}^+$  的总分布结果相差较大。

进一步构造精确的模型对于了解高剂量, 氧注入的分布机理十分有益, 但对于一个 VLSI 的完整工艺模拟器的一部份, 这样的模型是不可取的, 因为它将耗费大量的内存和

\* 国家自然科学基金资助课题的一部分。

运算时间。考虑到这一要求, 我们寻求一种能比较好地描述氧注入分布的经验公式和方法, 以作为正在开发的 VLSI 工艺模拟器的一部份。

下面依次讨论我们提出的经验公式和方法以及与有关理论计算和实验的若干比较。

## 二、模型公式

已有研究表明硅中高剂量氧注入中的氧分布有以下一些特点:

1. 在注入剂量较低, 尚不足以达到饱和浓度时, 近似于高斯分布。
2. 当注入剂量足够大, 使达到饱和浓度时, 将出现所谓“平顶现象”。(如图 1 所示)
3. 当峰值达到饱和以后, 剂量进一步增大, 将使富氧层前部向表面推进, 但对后部影响较小。
4. 注入时的硅片温度对氧的分布有一定影响。
5. 存在  $\text{Si} \rightarrow \text{SiO}_2$  的体积膨胀和表面溅射效应。
6. 高温退火将使富氧层向中心收缩, 趋于形成陡直的  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  界面。

为了适合上述的特点, 我们提出如下的经验公式

$$N(x) = K \cdot (\text{Dose}) \cdot \exp \left[ -\frac{(x - R_p)^2}{2 \cdot (\alpha \cdot \sigma_p)^2} \right] \quad (1)$$

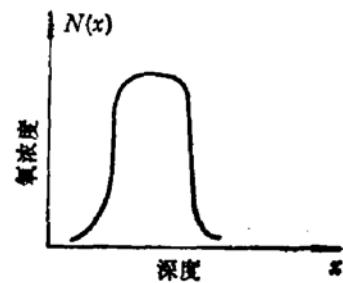


图 1 大剂量氧注入的平顶现象

即认为注入氧的分布在形式上仍为高斯分布, 但在标准偏差项  $\sigma_p$  前有一经验修正因子  $\alpha$ ,  $\alpha$  同注入能量、注入时的硅片温度  $T$ , 有关, 而公式中  $K$  是归一化系数。通过对已有的实验数据处理, 可得到在特定剂量、能量下  $N(x)$  与  $\alpha$  的关系, 根据这一实验结果的规律作适当的外推、插值计算, 就可得到各种不同能量及剂量情况下  $N(x)$  与  $\alpha$  的关系曲线, 由此曲线及关系式(1), 最终可得  $N \sim x$  关系, 即氧注入分布。未满足峰值饱和浓度时, 这一经验公式应退化为标准高斯分布, 此时  $\alpha = 1$ ,  $K = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p}$ 。当注入剂量足够大, 使峰值达到饱和值 ( $4.6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ) 时, 有

$$\alpha = \alpha_0 [N(x)] \left( \beta t^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1.15 \times 10^7}{\alpha t}} + 1 \right)$$

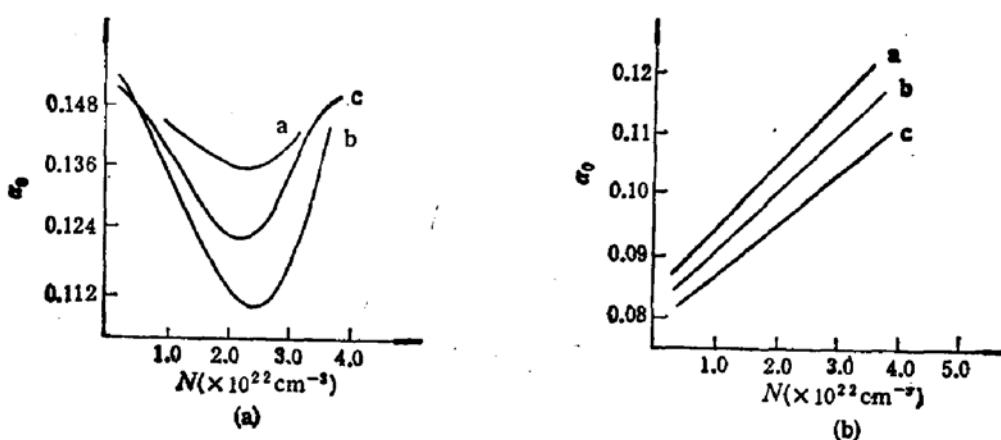


图 2  $\alpha_0$  与  $N(x)$  关系图

(a) 富氧层前部 (b) 富氧层后部 剂量 a:  $1.4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , b:  $1.9 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , c:  $2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$

其中  $\alpha_0[N(x)]$  是  $T = 300\text{K}$  (即室温)时的经验修正因子。 $\alpha_0[N(x)]$  的数值我们从 Das<sup>[5]</sup> 实验曲线上提取, 见图 2。这一剂量范围是 SIMOX 技术中常用的, 对位于这一范围之内或以外的其他剂量的注入可采用外推、插值的方法得到  $\alpha_0$ 。由图 2 可见对于富氧层前后部分,  $\alpha_0$  与  $N(x)$  的关系是不同的, 前界面  $\alpha_0$  与  $N(x)$  关系近似呈抛物线, 后界面近似呈直线。通过曲线的拟合, 得到  $\alpha_0$  与  $N(x)$  的关系式可直接用于计算机模拟。 $(\beta t + e^{-\frac{1.15 \times 10^4}{T}} + 1)$  为温度修正项; 式中  $T$  是硅片温度, 单位为绝对温度;  $t$  是时间, 单位是秒,  $\beta$  是待定的经验系数。

### 三、结果及比较

以下我们给出用上述模型公式模拟得出的若干结果, 并同其它文献的有关计算结果和实验数据进行比较:

1. 模拟值与 Maydell-Ondrusz 等<sup>[2]</sup>计算结果的比较, 见图 3 所示由图可见, 在  $O^+$  分布形状上, 我们和 Maydell 等计算结果仅有很小差别。图中我们还给出了一个实验点, 该点和我们的结果较接近, 这表明在有差别的地方, 我们的模拟结果似乎更接近实验值。由于我们模型公式中所用的参数是在实验曲线上提取的, 因此自然地较接近于实验值。

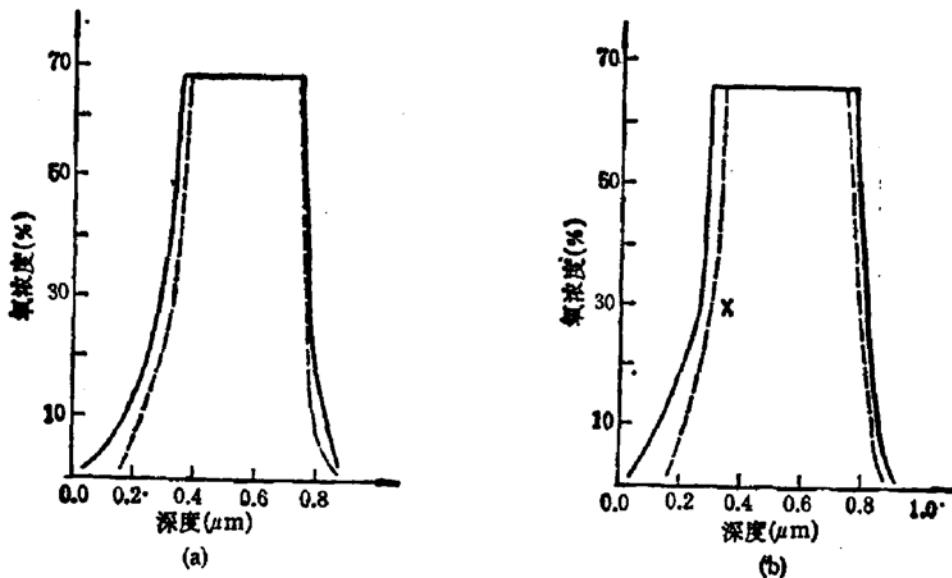


图 3 模拟值与 Maydell 等计算结果的比较

(a) 200keV,  $O^+ 1.8 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$  (b) 200keV,  $O^+ 2.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$

——模拟结果   ----Maydell 等计算结果   ×实验点

2. 模拟值与卢瑟福背散射能谱 (RBS) 实测值<sup>[6]</sup>的比较。见表 1。
3. 模拟值与俄歇电子能谱 (AES) 实测值<sup>[7]</sup>的比较。见表 2。
4. 二次埋层注入后,  $\text{SiO}_2$  厚度和位置的模拟值与 SIMS 实测值比较<sup>[6]</sup>。二次埋层注入示意图及有关比较分别见图 4 及表 3。
  - (1) 第一次注入 300keV,  $0.9 \times 10^{18} \text{cm}^{-2} O^+$  注入。
  - (2) 第二次注入 150keV,  $0.9 \times 10^{18} \text{cm}^{-2} O^+$  注入。

表 1 退火前富氧层厚度的模拟值与 RBS 实测值比较 (400keV, 衬底加热)

注入剂量 $\text{cm}^{-2}$	$1.6 \times 10^{14}$	$1.8 \times 10^{14}$	$2.1 \times 10^{14}$	$2.4 \times 10^{14}$
富氧层厚度 ( $\mu\text{m}$ )	RBS 实测值	0.31	0.50	0.64
	模拟值	0.34	0.40	0.68

表 2  $\text{SiO}_2$  埋层位置及厚度的模拟值与 AES 实测值比较  
(150keV, 注入后经高温退火)

注入剂量 $\text{cm}^{-2}$	$\text{SiO}_2$ 位置及厚度 数据及来源	前界面位置	后界面位置	$\text{SiO}_2$ 厚度
$2.4 \times 10^{14}$	AES 实测值 ( $\mu\text{m}$ )	0.09	0.60	0.51
	模拟值 ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.62	0.52
$1.8 \times 10^{14}$	AES 实测值 ( $\mu\text{m}$ )	0.17	0.58	0.41
	模拟值 ( $\mu\text{m}$ )	0.16	0.62	0.46

表 3  $\text{SiO}_2$  埋层位置及厚度的模拟值与 SIMS 实测值比较

数据来源	$x$ 值	$x_1(\mu\text{m})$	$x_2(\mu\text{m})$	$x_3(\mu\text{m})$	$x_4(\mu\text{m})$
SIMS 实测值		$0.23 \pm 0.01$	$0.20 \pm 0.02$	$0.26 \pm 0.02$	$0.18 \pm 0.02$
模拟值		0.204	0.206	0.236	0.206

## (3) 退火 30 分钟, 1405°C

从表 1 至表 3 列出的比较中, 我们可以看出, 我们的经验计算公式与实测值有较好的符合, 有一定的精度, 能满足有关 SIMOX 注入分布的模拟。

## 四、结 论

我们提出了一个用于 SIMOX 注入分布模拟的经验公式, 并用此公式对某些氧注入分布进行了模拟, 模拟结果和有关理论计算结果及实测结果相比有较好的符合。由于我们提出的模拟公式既有一定精度又形式简单, 因此非常适合于作为 VLSI 全工艺模拟器中的一部分, 为 VLSI 研制中应用 SIMOX 技术提供了一个简便、有效的设计、分析工具。

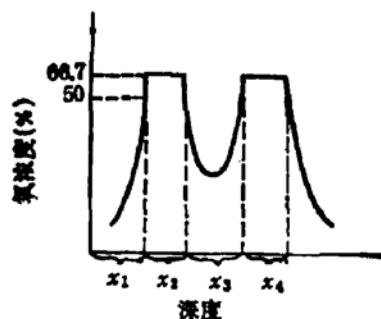


图 4 二次埋层注入示意图

### 参 考 文 献

- [1] T. Hayashi *et al.*, *Instr. Phys. Conf. Ser.*, **59**, 559 (1981).
- [2] E. A. Maydell-Ondrusz and I. H. Wilson, *Thin Solid Films*, **114**, 357 (1984).
- [3] H. U. Jäger, *et al.*, *Thin Solid Films*, **123**, 159(1985).
- [4] R. J. Chater, *et al.*, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, (1985).
- [5] K. Das, *et al.*, *J. Electronic Materials*, **13**, 635(1984).
- [6] P. L. F. Hemment, *et al.*, *Nucl. Instru. & Meth. in Phys. Res.*, **B21**, 129(1987).
- [7] H. U. Jäger, *Nucl. Instru. & Meth. in Phys. Res.*, **B15**, 748(1986).

## Simulation of Oxygen Distribution in the Oxygen Implanted SOI Structure

Ruan Gang, Xu Chenxi and Yu Qiang

*(Microelectronics Institute, Fudan University, Shanghai)*

### Abstract

An emperical formula to simulate the oxygen implanted distribution for SIMOX technique have been proposed. Using this formula, the simulation results are in good agreement with some experimental and former theoretical results. Our formula is both simple and accurate, which is suitable for using as a part of the VLSI complete process simulator.

**KEY WORDS:** SIMOX technique, Oxygen implantation, Implanted profile, profile, process simulation