

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

汤 庭 鳌

(复旦大学电子工程系)

Carlos Araújo

(University of Colorado)

1985年10月29日收到

本文采用玻尔兹曼变换法求解高浓度下的砷和硼的扩散方程，并以高斯分布作为离子注入的初始分布，得到了杂质在退火过程中再分布的新的解析模型。还得到了结深、峰值浓度等随退火条件变化的解析表达式。这些结果对 MOS 和双极器件、电路的工艺设计有实际参考价值。也能用来改进 SUPREM 工艺模拟中所采用的模型。

一、引言

离子注入砷及硼在硅中的再扩散问题，多年来一直受到人们的极大重视。尤其是在高浓度下的扩散机理及模型更引起大家的兴趣。这不仅是由于注入砷及硼在扩散期间的分布形状对器件性能，例如 MOS 场效应管的阈值电压、击穿特性、亚阈值电流等具有显著的影响，而且对工艺过程的计算机辅助模拟也是必不可少的。在较早阶段，人们用高斯分布来描述注入离子的分布，并引进两个参数：平均投影射程 R_p 及平均投影射程的标准偏差 ΔR_p ，这两个参数可用 LSS^[1] 理论来计算。实践表明用对称的高斯分布来描述注入杂质分布仅是第一级近似。J. Gibbons 及 S. Mylroie^[2] 曾用两个相联的半高斯分布来描述砷和磷的分布，但并未取得完全的成功。Hofker 等人^[3] 还曾考虑到注入硼的分布用标准 Pearson IV 分布来描述，但其分布的尾部与实验差距甚大。以后又有用修正的 Pearson IV 模型来描述注入硼的分布^[4]，但仍未涉及与杂质浓度有关的再扩散问题。Fair 等人^[5,6] 曾发展了一种带电空位模型，用作描述注入砷在硅中的扩散机理，它目前已在 SUPREM III 中被采用。但在该带电空位模型中并不包括注入能量、剂量、高温处理时间及温度等参量的影响，并且无成功的杂质再分布解析模型。近年来，美国国家标准局研究了砷扩散模型^[7]，但在他们的工作中，注入能量固定为 100 keV，注入范围为 $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 到 $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ，故有显著的局限性。NSB 的研究表明对注入砷扩散的模型尚有许多工作留下。Ghezzo 利用玻尔兹曼变换法求解了与浓度有关的扩散方程^[8,9]，得到了一个描述离子注入再分布的解析表达式，但由于选用的初始条件不太合适，故结果不太理想。

本文分析了与浓度有关的砷与硼的扩散系数，利用玻尔兹曼-曼特诺变换方法，求解

高浓度下的扩散方程，改进了 Ghezzo 所采用的 delta 函数初始条件，而采用高斯分布作为初始条件，引入了与注入条件、退火条件有关的重要的参数 K_1 , σ ，导得了分成两个区域的杂质再分布解析表达式。还得到了结深、峰值浓度、表面浓度等随注入条件及退火条件变化的解析表达式。同时还求得了在高浓度下的砷、硼杂质扩散系数的表达式及数值计算结果。将解析结果与 SIMS 实验结果及 SUPREM III 模拟结果相比较表明，对于砷注入样品(能量为 80 keV, 剂量为 $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$)，退火条件在温度为 950—1050℃范围内，用本文的解析式算出的结深随时间的变化介于 SIMS 与 SUPREM 结果之间。对于硼注入(能量为 25 keV, 剂量为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$)，退火温度为 950℃时，用本文算出的结深随退火时间变化的曲线介于 SRP 实验数据及用 CHEBYSHEV 公式算出的结果之间。说明本解析结果与实验符合甚佳，在 LSI 电路工艺设计中有实际参考价值。

二、理论分析

我们的主要目标是要导得一个杂质分布的较正确的解析表达式，它能用来描述离子注入退火过程中的杂质再分布规律，并满足恰当的初始及边界条件。尤其需能描述高浓度下的扩散过程。通过求解下列扩散系数与浓度有关的扩散方程可以达到此目标。

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

其中 D 为与浓度有关的扩散系数， $N(x,t)$ 是杂质分布函数。

在非本征硅中，砷的扩散系数可用下式表达^[10]：

$$D_{As}(N) = h \left[D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{N_i} \right) \right]. \quad (2)$$

其中 N_i 为处理温度时的本征载流子浓度， D_i^0 是由中性空位引起的本征扩散系数， D_i^- 是由单负电荷空位引起的本征扩散系数； h 用以描述电场效应，它由下式给出：

$$h = 1 + \frac{N}{2N_i} \left[\left(\frac{N}{2N_i} \right)^2 + 1 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (3)$$

公式(2)由 Fair^[11] 采用 Nakajima 等人的方法^[12] 予以简化。当 $n \cong N \geq N_i$ 时， D_i^0 较小， $\frac{N}{N_i} \cdot D_i^- \gg D_i^0$ ，并有 $h \cong 2$ ，从而(2)式可改写为

$$D_{As}(N) \cong 2D_i^- \left(\frac{N}{N_i} \right) - D_i \left(\frac{N}{N_i} \right). \quad (4)$$

式中

$$D_i^- = D_0^- \exp[-E_A/kT]. \quad (5)$$

其中 D_0^- 为温度趋于无限大时扩散系数的渐近值； E_A 为砷的激活能； k 为玻尔兹曼常数。对于硼的扩散系数，可以用同样的方法得到，其差别只是用带单正电荷空位的扩散机理代替带单负电荷空位的扩散机理。经分析可得

$$D_B(N) \cong 2D_i^+ \left(\frac{N}{N_i} \right) - D_i \left(\frac{N}{N_i} \right). \quad (6)$$

其中

$$D_i^+ = D_0^+ \exp[-E_A/kT]. \quad (7)$$

它是由单正电荷空位引起的本征扩散系数。

对于更一般的情况，可假定

$$D = KN^m(x, t). \quad (8)$$

式中

$$K = \frac{D_i}{N_i^m}. \quad (9)$$

它是与扩散杂质种类及温度有关的常数； m 为正整数，当 $m = 1$ ，(8) 式回到(4)式或(6)式。对于磷扩散，由于扩散机理主要是双负电荷空位所引起，故 $m = 2$ 。

采用 Boltzmann-Mantano 变换法，令杂质分布为

$$N(x, t) = f(t) \cdot F(x \cdot f(t)) = f(t) \cdot F(\eta), \quad (10)$$

$$\eta = x \cdot f(t). \quad (11)$$

式中 $f(t)$ 是与时间有关的函数， $F(\eta)$ 是 $x \cdot f(t)$ 的函数。经此变换，变量 (x, t) 改变为 (η, t) 。

将(10),(11),(8)式代入扩散方程(1)，可得到

$$f'(t) \frac{d}{d\eta} [\eta F(\eta)] = K f^{(m+3)}(t) \cdot \frac{d}{d\eta} \left[F^m(\eta) \cdot \frac{dF(\eta)}{d\eta} \right]. \quad (12)$$

为求解方程(12)，可利用分离变量法，即令

$$\frac{f'(t)}{K f^{(m+3)}(t)} = -K' = \frac{\frac{d}{d\eta} \left[F^m(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta} \right]}{\frac{d}{d\eta} [\eta F(\eta)]}. \quad (13)$$

其中常数 K' 将由边界条件确定。由(13)式可得到两个分别关于时间和空间部分的常微分方程。

$$f'(t) = -KK' f^{(m+3)}(t), \quad (14)$$

$$K' \frac{d}{d\eta} [\eta F(\eta)] = -\frac{d}{d\eta} \left[F^m(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta} \right], \quad (15)$$

对方程(14)，从 0 到 t 进行积分，可得

$$f(t) = \frac{f(0)}{[1 + KK'(m+2)f^{m+2}(0) \cdot t]^{1/(m+2)}}. \quad (16)$$

其中常数 $f(0)$ 将由初条件决定。

将方程(15)对 η 积分，积分范围为 η 到无穷大，可得

$$K' \eta F(\eta) = -F^m(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta}. \quad (17)$$

这里已考虑了下述条件：

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} [\eta F(\eta)] = 0, \quad \lim_{\eta \rightarrow \infty} \left[F^m(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta} \right] = 0. \quad (18)$$

方程(17)可在 2 个区域内进行积分：(i) 从 0 到 η_p ，其中 $\eta_p = x_p \cdot f(t)$ 。(ii) 从 η_p 到 η 。考虑到砷和硼扩散均主要由单电荷空位与杂质相互作用引起的，所以 $m=1$ 。于是可得到下列结果：

$$N_1(x, t) = f(t) \left[F(0) - \frac{K'}{2} x^2 \cdot f'(t) \right], \quad (x \leq x_p) \quad (19)$$

$$N_2(x, t) = f(t) \cdot \left[F(\eta_p) - \frac{K'}{2} f'(t)(x^2 - x_p^2) \right]. \quad (x \geq x_p) \quad (20)$$

为了得到最后的杂质分布公式，必须确定 (19), (20) 式中的 K' , $F(0)$, $f(0)$, $F(\eta_p)$ 等常数。为此，假定下列初始和边界条件：

(i) 在 $t = 0$ 即开始退火前，在 $0-x_p$ 之间的杂质分布由高斯分布函数确定。对于离子注入情况，这仅是一级近似。考虑到 Ghezzo^[8,9] 采用的是 delta 函数，本假定比他们更接近实际情况。另外，考虑到高斯分布的前部与实际偏离较大，故只假定了 $0-x_p$ 范围。

(ii) 在峰值位置 x_p 处， N_1 与 N_2 必须连续。 x_p 可由极值条件一级导数为零的条件得到。

(iii) 在 $t = 0$ 时，在半导体表面 $x = 0$ 处，杂质浓度为

$$N_1(0, 0) = f(0)F(0) = N_{p0} = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{R_p}{\Delta R_p} \right)^2 \right]. \quad (21)$$

式中 ϕ 为离子注入剂量， R_p 为平均投影射程， ΔR_p 为平均投影射程的标准偏差。

根据上述条件可以直接导得杂质分布函数为：

$$\begin{cases} N_1(x, t) = \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-R_p}{\Delta R_p} \right)^2} - \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1 \right) \frac{K_1}{2} x^2 \right], & (x \leq x_p) \\ N_2(x, t) = \frac{1}{\alpha} \left[N_{p0} - \frac{K_1}{2\alpha^2} (x^2 - x_p^2) \right]. & (x \geq x_p) \end{cases} \quad (22)$$

式中 N_{p0} 为初始峰值浓度

$$N_{p0} = f(0)F(\eta_p) = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}}. \quad (24)$$

峰值位置 x_p 由 N_1 一级导数为零的条件可得

$$x_p(t) = \frac{N_{p0}R_p}{\Delta R_p^2 \left[\frac{N_{p0}}{\Delta R_p} + \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1 \right) K_1 \right]}. \quad (25)$$

α 为与 t 有关的表式，它由下式确定

$$\alpha = [1 + 3KK'f^3(0)t]^{\frac{1}{2}} = [1 + 3KK_1t]^{\frac{1}{2}}. \quad (26)$$

由上式可知， α 为与注入条件及退火条件密切有关的量。

三、结果与讨论

由描述砷、硼杂质扩散再分布的新的解析表达式 (22) 及 (23) 式，可以得到许多重要且有用的结果。

(1) 与时间有关的结深解析表达式

由结深的条件 $N_2(x_i, t) = N_B$ ，经过简单的推导，可以得到与时间有关的结深的解

析表达式:

$$x_i(t) \doteq x_i(0)[1 + 3KK_1t]^{\frac{1}{3}}. \quad (27)$$

其中 $x_i(0)$ 为退火前的初始结深, 它与其他参数的关系为:

$$x_i(0) = \left[\frac{2(N_{p0} - N_{s0})}{K_1} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (28)$$

在结较陡的情况下, 上式可近似为

$$x_i(0) \doteq \left[\frac{2N_{p0}}{K_1} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (29)$$

由此, 可得到 K_1 的表达式

$$K_1 = \frac{2\phi}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p x_i^2(0)}. \quad (30)$$

它是与注入条件密切相关的重要参量, 其量纲为 [cm^{-3}].

对于砷和硼的 K 值, 分别由以下两式确定:

$$K_{As} = \frac{2D_0^- \exp[-E_A(A_s)/kT]}{N_i} \quad (31)$$

$$K_B = \frac{2D_0^+ \exp[-E_A(B)/kT]}{N_i}. \quad (32)$$

K 的量纲为 [$\text{cm}^5 \cdot \text{s}^{-1}$].

图 1 表明用本解析结果与 SIMS 实验测量结果 (实验数据是由美国 NCR 公司给出的) 及用 SUPREM III 模拟结果的比较。砷离子注入剂量为 $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, 能量为 80 keV, 退火分别在 950°C, 1000°C, 1050°C 三种温度下进行。比较表明本文的结果比 SUPREM 更接近 SIMS 实验结果, 尤其在 1000°C 时更佳。

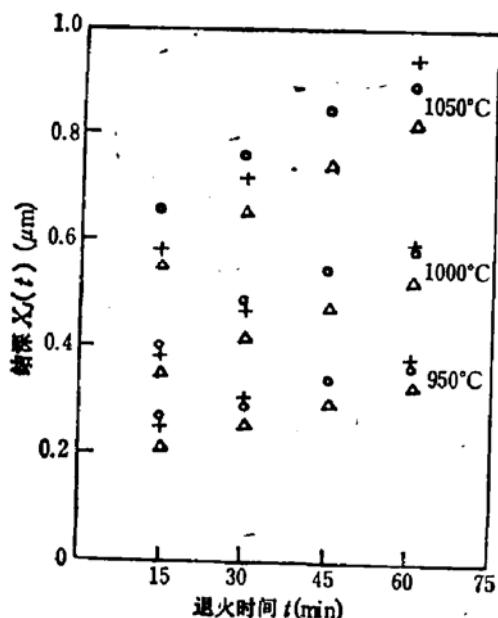


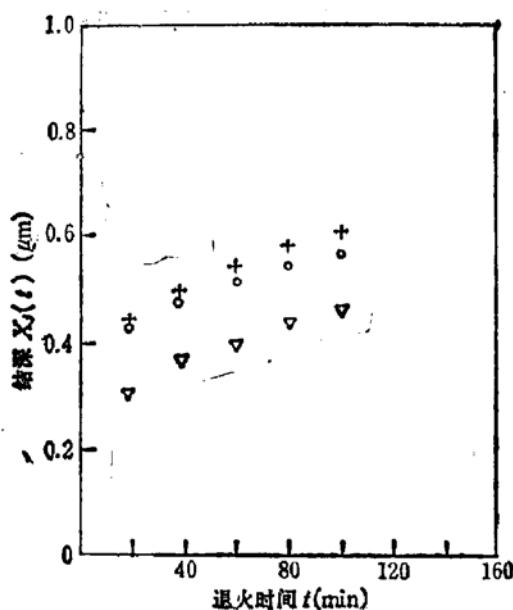
图 1 $x_i(t) \sim t$
+ 解析解 OSIMS \triangle SUPREM III 砷注入能
量 80keV 剂量 $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$

图 2 是本解析结果与 SRP 实验测量结果 (University of California, 1983 年 8 月) 及用 CHEBYSHEV 理论计算结果的比较。硼离子注入的能量为 25 keV, 剂量为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 退火温度固定为 950°C。比较表明本解析结果比 CHEBYSHEV 理论更接近实验测量数据。公式 (27) 对半导体器件和集成电路的工艺设计有一定实用价值。

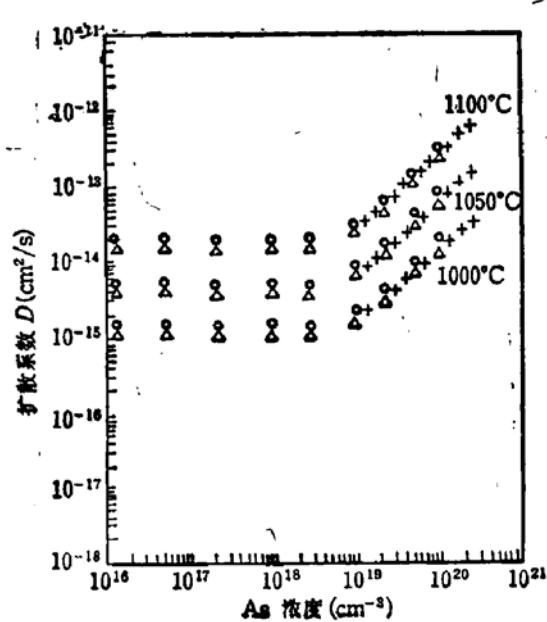
(2) 高浓度下的杂质扩散系数

Ghezzo 曾得到过高浓度下砷扩散系数与浓度、浓度梯度及时间的关系为

$$D = -\frac{N(x_0, t)x_0}{2t \left(\frac{dN}{dx} \right) \Big|_{x_0}}. \quad (33)$$

图 2 $x_p(t) \sim t$

+ 解析解 O SRP △ CHEBYHEV 解硼注入能量 25keV 剂量
 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ $T = 950^\circ\text{C}$

图 3 $D \sim N$

+ 解析解 O SIMS △ SUPREM

但此结果的准确性不够令人满意。

利用本文的方法及 $N(x, t)$ 的表达式, 很易导得高浓度下砷、硼的扩散系数可以表示为:

$$D = -\frac{KK_1x_0N(x_0, t)}{(1 + 3KK_1t)\left(\frac{dN}{dx}\right)|_{x_0}}. \quad (34)$$

图 3 给出用公式 (34) 的计算结果与实验及 SUPREM 模拟结果的比较(后二数据来自美国 TMA 公司 1984 年 6 月)。结果表明在高浓度区域, 用公式 (34) 计算的砷扩散系数与实验结果符合良好。

(3) 峰值浓度及表面浓度随时间的变化

由公式 (22) 很易得到峰值浓度及表面浓度随时间的变化规律, 它们的形式为:

$$N_p(x_p, t) = \frac{N_{p0}}{[1 + 3KK_1t]^{\frac{1}{2}}}, \quad (35)$$

$$N(0, t) = \frac{N_{s0}}{[1 + 3KK_1t]^{\frac{1}{2}}}. \quad (36)$$

四、结 论

由本文得到的注入离子杂质在高温退火下再分布的解析形式, 包含了离子注入条件, 退火温度及时间的影响, 对于半导体器件及集成电路工艺的选择具有实用价值, 其特点是公式简洁, 意义明确, 计算方便。尤其是结深 $x_i(t)$ 与 t 的三分之一次方关系比传统的

$\frac{1}{2}$ 次方关系及常用的 CHEBYSHEV 公式更为正确, 更符合实验结果。本方法还可推广到讨论氧化气氛下的退火过程、快速热退火过程。可用来讨论注入条件及退火情况对器件参数例如击穿电压、阈值电压、穿通效应等的影响, 对表面迁移率、方块电阻的影响等。还可将本解析模型用于 SUPREM 工艺模拟程序, 得到更佳的工艺模拟结果。此外, 二维工艺模拟与模型也可用本方法予以讨论。

参 考 文 献

- [1] J. Lindhard, M. Scharff and M. Schiott, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 33, 1(1963).
- [2] J. Gibbons and S. Mylroie, *Appl. Phys. Lett.*, 22, 568(1973).
- [3] W. H. Hofker et. al., *Rad. Effects*, 24, 223(1975).
- [4] D. A. Antoniadis et. al., SEL 78-020, Stanford Electronics Labs, Stanford University, June, (1978).
- [5] Richard, B. Fair, "Concentration profiles of diffused Dopants in silicon". Edited by F. F. Y. Wang, North-Holland Publishing Co. (1981).
- [6] Richard, B. Fair, and Joseph C. C. Tsai, *J. Electrochem. Soc.*, 122, 1689(1975).
- [7] J. Albers, P. Roitman and C. Wilson, *IEEE Trans. Electron Devices*, ED-30, November (1983).
- [8] M. Ghezzo, *J. Electrochem. Soc.*, 119, 977(1972).
- [9] M. Ghezzo, *J. Electrochem. Soc.*, 120, 1123(1973).
- [10] R. B. Fair, "Physics and Chemistry of impurity diffusion and oxidation of Silicon". in *Applied Solid State-Science Suppl. 2B*, Dawon Kahng Editor; New York, Academic Press. (1981).
- [11] R. B. Fair and J. C. C. Tsai, *J. Electrochem. Soc.*, 123, 583(1976).
- [12] Y. Nakajima, S. Ohkawa and Y. Fukukawa, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 10, 162(1972).

A New Analytical Model of High Concentration Arsenic and Boron Redistribution during Ion Implantation Annealing Course

Tang Tingao and Carlos Araujo

(Dept. of E. E., Fudan University) (Dept. of E. E., University of Colorado)

Abstract

A Boltzmann transformation is used to obtain a new analytical solution of the diffusion-equation for arsenic and boron concentration dependent diffusion with an ion implanted initial profile. The time dependent junction depth, peak concentration and surface concentration during thermal annealing course have been achieved. The results indicate that the well-known square root law between X_j and t is no longer valid in the case of concentration dependent redistribution. It has been replaced by a new cubic root law. These conclusions are proved by the experiments to some degree. They are very useful for the design and fabrication of MOS FETs and implanted bipolar transistors. They are also very useful to improve the SUPREM processing simulation.