

硼离子注入硅的剖面分布

李国辉 王兴民 卢志恒 张通和 田淑芸

(北京师范大学低能物理研究所)

1982年7月2日收到

提 要

本文研究了硼离子注入硅的载流子浓度分布。实验表明,载流子浓度分布可以近似用线性扩散方程的解来描述。因此,通过结深的实验值得到了一套随注入剂量,退火温度和时间变化的扩散系数。用这套扩散系数又可以计算出能量40—400keV,剂量 5×10^{13} — 1×10^{14} cm⁻²,退火温度900°C—1100°C,退火时间15分—2小时这个范围内的载流子浓度分布。

一、引 言

硼注入硅的载流子浓度分布规律在七十年代初期就有不少人^[1,2]进行了研究。他们提出了用扩散方程的解析解来描述硼注入后再扩散的分布。Gibbons等人^[3]又提出了硼注入后再扩散在损伤恢复前为增强扩散,损伤恢复后与热扩散一致的看法。还有不少人发表了一些测量的分布曲线和扩散系数,但没有发现有人将它们结合起来做系统研究。

本文为了满足器件工艺生产者要了解离子注入后注入层电参数的要求,将实验数据和模型计算结合起来计算了一整套结深、扩散系数、峰值浓度及载流子浓度分布与注入和退火条件对应的参数。

二、实验方法与结果

本工作中使用了n型<100>晶向的单晶硅片,电阻率为 $\rho = 5-7\Omega\text{-cm}$ 。此样品注入前做了激光定向,为了避免沟道效应注入时与晶向倾斜7°角。注入在室温下进行。注入能量为60keV—380keV,剂量为 5×10^{12} — 5×10^{14} cm⁻²。注入后样品在950°C氮气保护恒温退火22分钟。

(1) 载流子浓度剖面分布的测量结果

退火后样品用微分电导法测量了25条载流子浓度分布曲线。图1、2给出了部分所测曲线。

为了检验微分电导法的测量结果,又同时对100keV 1.8×10^{14} cm⁻²和300keV 5.6×10^{13} cm⁻²两个注入条件的样品用SIMS(二次离子质谱)法测量了杂质剖面分布。SIMS的

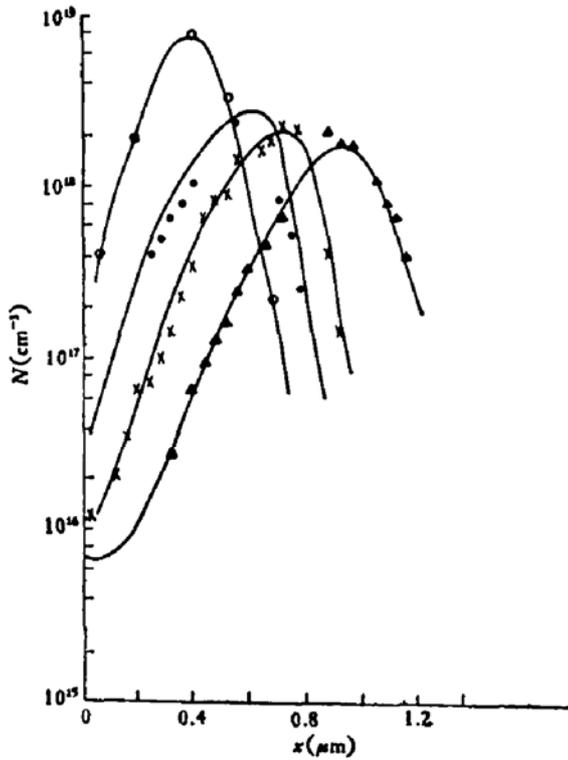


图1 B⁺注入 Si 950°C 22 分退火载流子浓度剖面

- 60keV $2.2 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$
- 220keV $8.7 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$
- × 260keV $6.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$
- ▲ 340keV $5.6 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$

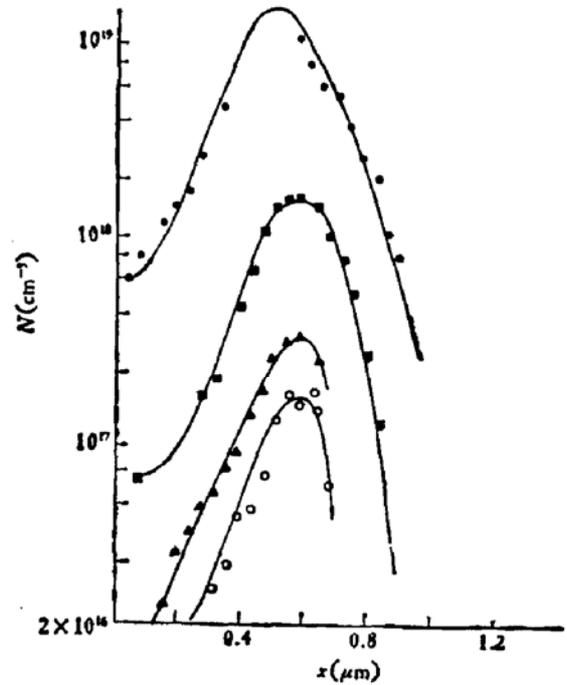


图2 B⁺注入 Si 950°C 22 分退火载流子浓度剖面 200keV 能量

- $3.2 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$
- ▲ $5.7 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$
- $4.6 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$
- $4.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$

测量结果用实线表示,微分电导法测量结果用实验点▲或●表示,从图3看到两条曲线中SIMS法测量结果与微分电导法测量结果都比较一致。(一般认为这条件下激活率已经达到100%^[4]).

(2) 峰值位置 R_p 的确定

从这些剖面中可以看到随着能量增加,峰值位置逐渐加深.在300keV能量注入时出现了埋层.图4显示了各条分布曲线峰值位置 R_p 与注入能量 E 的关系,所得实验值和Lindhard^[5]的理论值基本相同,实验与理论符合较好.因此在以后的理论计算中 R_p 值选用Lindhard的理论值 R_p .

(3) 结深与注入和退火条件的关系

为了得到各种注入退火条件下的扩散系数,用100keV能量 $7.5 \times 10^{13} - 1.5 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 剂量的硼注入硅单晶,并在900°C—1100°C退火30分—2小时.退火后样品用水电解法^[6]测量了结深值与退火温度、时间和注入剂量的关系.图5只给出了900°C退火的数值.由图可以看到随剂量的加大结深逐步加深,随退火时间的加长结深加深.这与原田宙辛^[2]报道的结果一致.通过这些测量得到了一批900°C,1000°C,1100°C不同时间退火样品的结深数据.

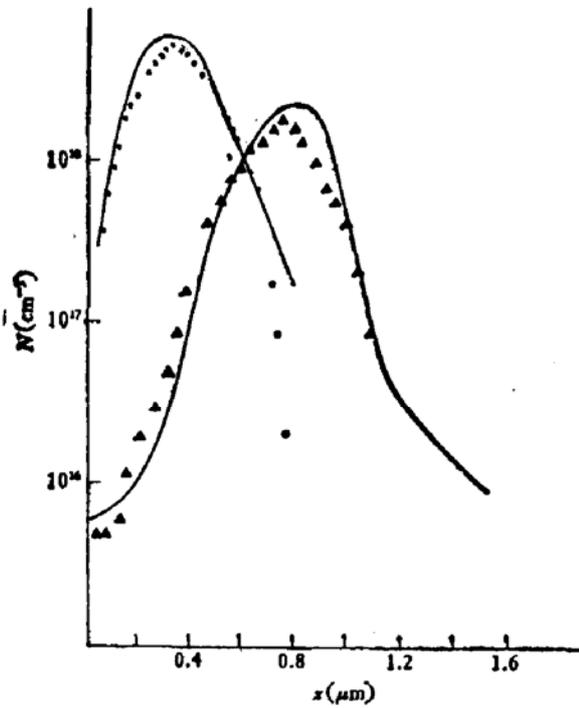


图3 微分电导法与 SIMS 法测量剖面比较

— SIMS 测量
 ●▲ 微分电导法实验点
 ● 100keV $1.8 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$
 ▲ 300keV $5.8 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$
 950°C 22 分退火。

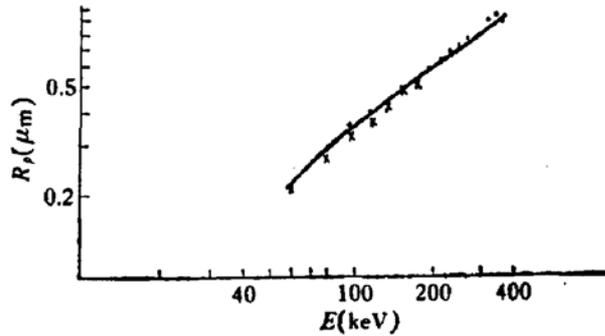


图4 R_p 与注入能量 E 的关系, 实验 R_p 与 Lindhard 理论 R_p 比较

● 实验 R_p × Lindhard 理论 R_p

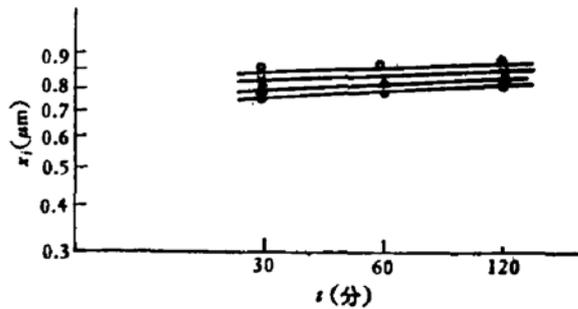


图5 900°C 退火时结深与退火时间的关系

注入剂量: ● $7.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ▲ $1.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$
 × $7.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ ○ $1.5 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$

三、拟合模型与实验的比较

(1) 拟合计算模型

离子注入半导体中的杂质原子在退火过程中, 由于热运动在半导体内迁移, 这就是离子注入后的再扩散。由 Fick 定律推出的扩散方程^[7]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \quad (1)$$

其中 N 为杂质浓度, D 为扩散系数, x 为样品深度, t 为扩散时间。在没有外扩散的情况下, 初始条件是高斯分布时, 这个方程的解析解已经由文献[1]、[2]给出, 如下式:

$$N(x, t) = \frac{\phi/2}{\sqrt{\pi} \sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \left\{ \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\frac{R_p \sqrt{4Dt}}{\sqrt{2} \Delta R_p} + \frac{x \sqrt{2} \Delta R_p}{\sqrt{4Dt}}}{\sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \right) \right] \exp \left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt} \right) + \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\frac{R_p \sqrt{4Dt}}{\sqrt{2} \Delta R_p} - \frac{x \sqrt{2} \Delta R_p}{\sqrt{4Dt}}}{\sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \right) \right] \exp \left(-\frac{(x + R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt} \right) \right\} \quad (2)$$

其中 R_p 为平均投影射程, ΔR_p 为标准偏差, D 为扩散系数, t 为退火时间, ϕ 为注

入剂量。要进行计算和实验曲线的拟合, 必需求出扩散系数 D 。在 950°C 退火时, 方程(1)的解可以表示如下:

$$N(x, t) = \frac{\phi}{\sqrt{\pi} \sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}\right)$$

利用这个简化解可以推出扩散系数 D 。在扩散后的分布中, 当浓度为峰值浓度的 $e^{\pm 1}$ 倍时, 半宽度 $\Delta R_p'$ 由下式求出:

$$\Delta R_p'^2 = \Delta R_p^2 + 2Dt$$

在实验中 $t = 0$ 时刻浓度分布与 LSS 理论计算相符^[8], 因此 ΔR_p 取理论值的标准偏差 ΔR_p 。这样可以求出每条实验曲线对应的扩散系数。所得扩散系数 D 随剂量增加稍有增加, 而能量对它影响不大。这是因为扩散系数与注入层的浓度和损伤有关, 而注入能量对它的影响小得多, 所以能量对扩散系数的影响可以忽略。

(2) 模型计算和实验的比较

根据 Lindhard 的理论值 R_p 、 ΔR_p 和 950°C 不同剂量的扩散系数 D , 利用公式(2)可以算出硼在硅中 $40\text{keV}-400\text{keV}$ 能量 $5 \times 10^{13}-5 \times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ 剂量注入的样品 950°C 22 分退火时的载流子浓度分布。图 6 画出了 200keV $4.5 \times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ 和 $4.6 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ 剂量注入硼的实验和计算曲线的比较。可以看到两条曲线中用实线表示的理论计算值和测量的实验点 \bullet 、 \blacktriangle 分别符合的较好。只是在表面处计算曲线比实验点偏低一些。这是因为解方程时把初始条件认为是对称的高斯分布, 但实际上表面浓度会高一些, 因此造成表面偏低。表 1 列出了 10 条在

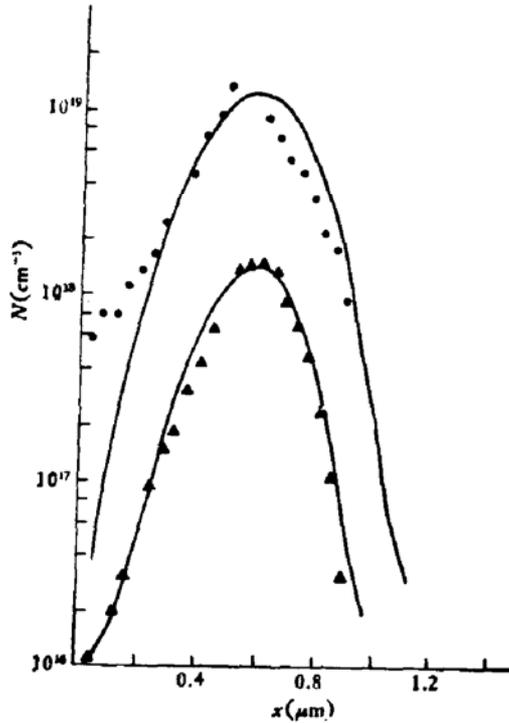


图 6 理论计算与实验比较
200keV 能量, 950°C 22 分退火
——理论计算值
 \bullet 、 \blacktriangle 测量的实验点
 \bullet $4.5 \times 10^{14}\text{cm}^{-2}$
 \blacktriangle $4.6 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$

表 1 列出了 10 条在

表 1 实验与计算曲线拟合情况 ($\eta = \frac{\text{计算值} - \text{实验值}}{\text{实验值}} 100\%$)

能量 (keV)	剂量 (cm^{-2})	η_{x_i} (%)	η_{N_p} (%)	$\eta_{\Delta R_p}$ (%)
60	1×10^{14}	-4.8	+1.6	+6.8
160	1×10^{14}	+0.4	+16.0	-0.8
220	1×10^{14}	+4.6	+0.7	-2.6
280	1×10^{14}	-4.8	-12.0	-0.3
300	1×10^{14}	+1.6	0	-4.0
360	1×10^{14}	-5.4	+13.0	-2.1
380	1×10^{14}	+0.07	-11.0	+3.8
200	5×10^{13}	+8.3	-12.0	+22.0
200	5×10^{14}	-0.5	-6.0	+20.0
300	5×10^{13}	+3.2	-12.0	-0.4

950°C 22 分退火时的载流子浓度分布曲线模型计算和实验拟合情况。从中看到扩散后的结深 x_j 、半宽度 ΔR_p 及峰值浓度 N_p 计算值与实验值的误差大部分在 10% 左右。因此可以认为硼在硅中再扩散后载流子浓度分布可以用线性扩散方程的解来描述。

四、用模型计算载流子浓度分布

从以上分析看出硼的浓度分布形状由 (2) 式决定。公式中的量值 R_p 、 ΔR_p 根据上面的讨论用理论值代入。要计算出浓度分布关键是要得到与注入和退火条件对应的扩散系数 D 。这个 D 值可以通过结深处的浓度是衬底浓度这个事实用方程 (2) 得到。在方程 (2) 中, 结深值由上面测量得到, 因此将结深值、对应的 R_p 、 ΔR_p 及 $N(x_j, t)$ 为衬底浓度的条件代入方程 (2), 即可得到相应的扩散系数 D 。又因为扩散系数与注入能量的关系不大。则这一套扩散系数 D 可以在不同注入能量的条件下代入方程 (2), 就可得到不同注入能量, 注入剂量, 退火温度和时间的载流子浓度分布。

(1) 扩散系数 D 的求出

如上所述, 利用公式 (2) 得到了剂量在 $5 \times 10^{13} - 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 注入时, 900°C - 1100°C, 15 分 - 2 小时各种条件下退火的一套扩散系数。图 7 中画出了 30 分钟退火的 D 值。扩散系数 D 随剂量的加大稍有增加, 在 $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 剂量时增加速度加快, 这是由于它将接近于饱和和浓度的关系。

(2) 对扩散系数 D 的讨论

用上述方法得到在剂量是 $7.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 时 900°C 30 分钟退火的扩散系数是 $1.2 \times 10^{-14} \text{cm}^2/\text{s}$ 。而 900°C 常规热退火的扩散系数是 $1.4 \times 10^{-15} \text{cm}^2/\text{s}$ 。实验所得扩散系数比热扩散大一个数量级, 是增强扩散系数^[3,9]这就说明注入后样品的再扩散不再是单一的替位式的扩散, 而是由三部分组成^[3]:

(a) 替位硼的扩散 硼处在电激活状态, 硼通过与中性空位替位而进行扩散, 其扩散速度较慢, 在 900°C 时 $D = 1.4 \times 10^{-15} \text{cm}^2/\text{s}$ 。

(b) “BV” 对的扩散 当注入的硼原子在硅中停止时, 它们将全部同附近空位结合形成硼-空位 “BV” 对。它们是非电活性的快速扩散。在 900°C 时, $D \approx 7 \times 10^{-14} \text{cm}^2/\text{s}$ 。

(c) 带正电荷的空位 V 的扩散

因此硼在硅中注入后退火中的再扩散与电激活是有一定关系的。当退火开始时, 认

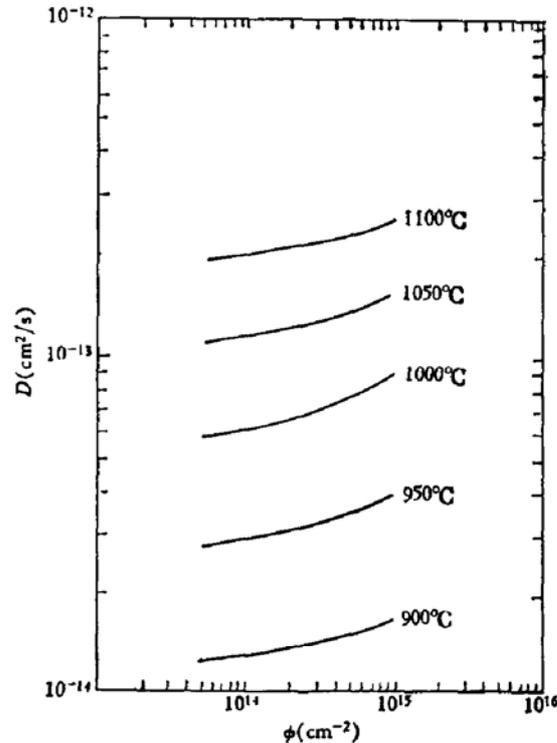


图 7 扩散系数与注入剂量、退火温度的关系
(30 分钟退火时)

为电活性很低,有大量的空位形成“BV”对,这时以“BV”对扩散为主. 其效果和增强扩散效果相当,在实验中得到的 900℃ 退火在 30 分钟以内扩散系数是 $1.21-1.90 \times 10^{-14}$ cm^2/s 就是以“BV”对扩散为主的一个平均效果.

实验测量了当剂量为 $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 时 30 分钟以后的扩散系数. 它很接近于常规热扩散的扩散系数,见表 2. 这时电激活率已经将近 100%^[10],注入层内的损伤已经恢复. 三元扩散已经转变为主要是替位硼的扩散,这与常规热扩散的机理基本一致,因此扩散系数就很接近常规热扩散了. 退火温度越高,扩散系数与热扩散越接近,这也说明退火温度高损伤恢复比较快.

表 2 退火 30 分钟后扩散系数与常规热扩散系数比较

退火温度 (°C)	退火30分钟后 $D(\text{cm}^2/\text{s})$	常规热扩散 $D(\text{cm}^2/\text{s})$
900	2.9×10^{-14}	1.7×10^{-14}
950	9.2×10^{-15}	6.0×10^{-15}
1000	2.7×10^{-14}	2.6×10^{-14}
1100	2.2×10^{-15}	2.5×10^{-15}

计算和测量所得的扩散系数与 Gibbons^[3]、Ziegler^[9] 得到的基本一致.

如前所述,扩散系数 D 实际上是与时间有关的. 但实验结果表明,退火后剖面分布与线性扩散方程的解相当符合. 因此,当我们用线性扩散方程的解去描述剖面分布时,其中的扩散系数 D 是指的整个退火过程的平均效果.

另外这个理论计算模型的应用范围是注入剂量在 $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 以下,因为剂量在 $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$ 时将产生硼的沉淀,模型要另做考虑. 又要求退火温度在 900℃ 以上,因为 900℃ 以下电激活率太低也会有硼的沉淀产生.

(3) 载流子浓度分布计算

将上面得到的一套扩散系数 D 代入公式(2)就计算出能量 40—400keV, 剂量 5×10^{14} — $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$, 退火条件 900℃—1100℃, 15 分—2 小时范围内的载流子浓度分布.

五、计算结果的实验验证与国内外数据比较

(1) 计算数据与实验数据比较

为了证明计算数据的可靠性,我们做了验证工作.

表 3 列出了计算所得的结深值与瑞士的离子注入机所做样品结深值的比较,最大相对误差大部分小于 10%,模型计算与实验值符合的相当好. 而且此计算结果对〈111〉单晶基本上也适用.

(2) 计算的载流子浓度剖面与国内外数据比较

图 8 画出了 O. Kudoh^[11] 用微分电导法(○)和微分扩展电阻法(·)测量的实验点. 样

表 3 模型计算的实验验证

注入条件	衬底条件	退火条件	x_j 实验值	x_j 计算值
60keV $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$\langle 111 \rangle 4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$	900°C 30分	0.49	0.50
60keV $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$\langle 111 \rangle 4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$	1000°C 30分	0.68	0.73
60keV $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$\langle 111 \rangle 4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$	1100°C 30分	0.99	1.04
140keV $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$\langle 111 \rangle 4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$	900°C 30分	0.81	0.76
60keV $4 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$	$\langle 100 \rangle 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$	950°C 30分	0.65	0.64
60keV $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$\langle 100 \rangle 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$	1100°C 30分	1.30	1.32
80keV $4 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$	$\langle 100 \rangle 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$	1000°C 30分	0.78	0.85
140keV $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$\langle 100 \rangle 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$	900°C 30分	0.99	0.97

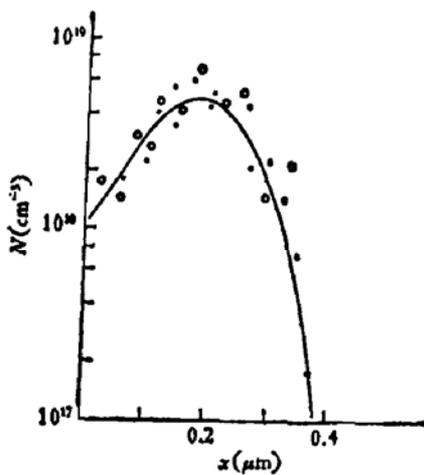


图 8 计算与 O. Kudoh 实验比较

50keV, $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$, 900°C 30分退火

— 计算曲线 O 微分电导法

● 微分扩展电阻法

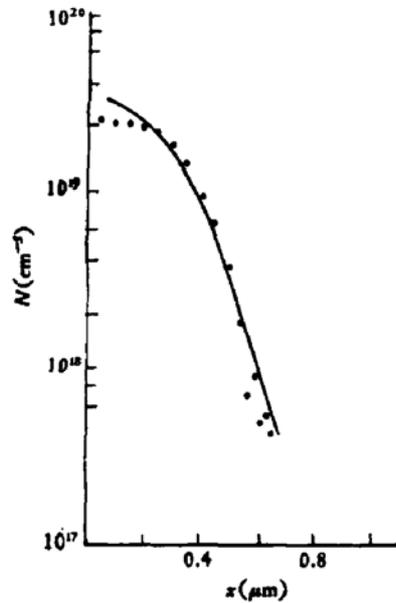


图 9 计算和 Ziegler 实验比较

40keV, $1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, 1000°C 30分退火

● B(n · ⁴He)⁷Li 测量点

— 计算值

品注入条件: 能量 50 keV, 剂量 $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$, 退火条件是 900°C 30 分钟。图中实线为我们计算的载流子浓度分布, 可以看到计算值与实验点符合很好。

图 9 画出了 Ziegler^[9] 用 $^{10}\text{B}(n \cdot ^4\text{He})^7\text{Li}$ 核反应测量的硼在硅中的杂质浓度分布实验点。样品注入条件: 能量 40keV, 剂量 $1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, 退火条件: 1000°C 30 分。图中实线是计算曲线。可以看到二者符合的也比较好。

图 10 画出了科学院半导体所用微分电导法测量的 60 keV 能量 $1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ 剂量注入, 900°C 30 分退火样品的载流子浓度分布和计算曲线的比较。图中两者符合很好。从上面实验验证和与国内外曲线比较说明这种测量和计算方法是可靠的。

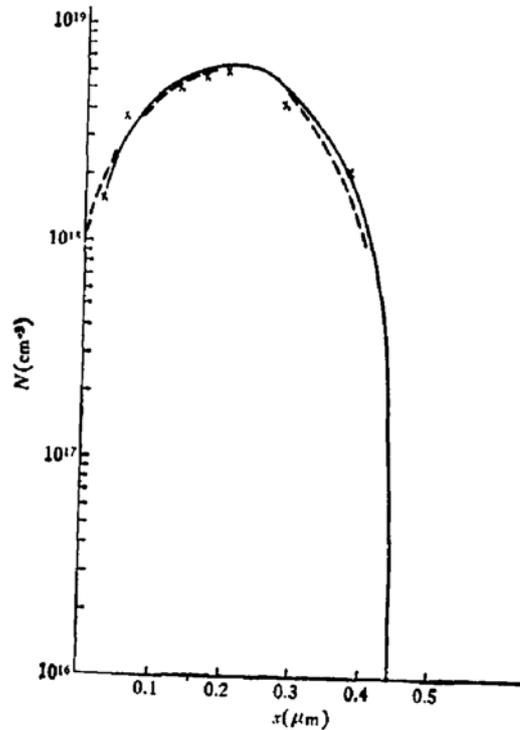


图 10 科学院半导体所测量曲线与计算曲线比较
 60 keV , $1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, 900°C 30 分退火
 —x— 测量点和曲线
 —— 计算曲线

六、结 束 语

本文所用的实验和计算方法是一种得到硼注入硅中注入层电特性比较好的方法。通过本文得到一套浓度分布曲线可供采用离子注入工艺的有关单位参考使用。本工作得到航天工业部 771 所、中国科学院半导体研究所及中国科学院科学仪器厂等单位协作在此表示感谢。参加本工作的还有吕贤淑、苏颖、沈京华、马云岗等同志并且得到本所加速器及电子学室大力协助。

参 考 文 献

- [1] H. Pyssel, in "Ion Implantation in semiconductors and other materials", Plenum Press, New York, B. L. Crowder Ed. P. 215(1973).
- [2] 原田宙辛, 应用物理, 45, 995(1976).
- [3] A. Chu and J. F. Gibbons, in "Ion Implantation in Semiconductors 1976", Plenum Press, New York, F. Chernow Ed. P. 711(1977).
- [4] J. C. Muller, R. Stuck, P. Siffert, in "Ion Implantation in Semiconductors 1976", Plenum Press, New York, F. Chernow Ed. P. 65(1977).
- [5] J. F. Gibbons, Proceeding's of the IEEE., 56, 259(1968).

- [6] 曾庆城, 物理学报, **30**, 249(1981).
- [7] P. D. Townsend, "Ion Implantation, Sputtering and their Applications", Academic Press, London, P. 88(1976).
- [8] S. Furukawa, in "Ion Implantation in Semiconductors", Plenum Press, New York, S. Namba Ed. P. 143(1974).
- [9] B. L. Crowder and J. F. Ziegler, in "Ion Implantation in Semiconductors and Other Materials", Plenum Press, New York, B. L. Crowder Ed. P. 267(1973).
- [10] J. Hirao, in "Ion Implantation in Semiconductors", Plenum Press, New York, S. Namba Ed., P. 599 (1974).
- [11] O. Kudoh, K. Uda, Y. Ikushima and M. Kamoshida, *J. Electrochem. Soc.*, **123**, 1751(1976).

A Study on Profiles of Boron Implanted in Silicon

Li Guohui, Wang Xingmin, Lu Zhiheng, Zhang Tonghe and Tian Shuyun
(*Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University*)

Abstract

The carrier profiles of boron implanted in silicon are studied. The experiments indicate that the profiles can be described approximately by the solution of linear diffusion equation. Based on this, the diffusion coefficient is determined by the experimental value of junction depth. The diffusion coefficient varies with the implantation dose, annealing temperature and annealing time. According to the diffusion coefficients, carrier profiles in the following range: energy 40—400 keV, dose 5×10^{18} — 1×10^{18} ions/cm², annealing temperature 900°C—1100°C and annealing time 15 minutes—2 hours, have been computed.