

硅中离子注入掺杂原子的增强扩散系数的分布

曾 论

(西南技术物理所,成都)

1988年6月13日收到

本文利用离子注入掺杂原子在热退火过程中的浓度分布 SIMS 数据计算了增强扩散系数的深度分布。这种增强扩散系数的分布反映了离子注入产生的损伤和缺陷分布及热运动特性。

主题词: 离子注入, 扩散系数分布, 增强扩散, 损伤

一、引言

半导体中离子注入掺杂原子在退火过程中的扩散一直是人们关心的问题。已经观察到硅中注入的 B, P, As, Sb 等原子在退火过程中表现出具有比“正常”的扩散大几个数量级的“异常”增强扩散运动^[1-17]。对于这种增强扩散运动机理,一些人认为^[1-4],注入的原子大部分处于间隙位置,在退火过程中能快速运动,从而使扩散运动增强。但 K. Cho^[5]的双硼离子注入的研究表明沟道间隙硼原子与增强扩散无关。A. E. Michel^[6]对注入样品在几种退火条件下的硼扩散再分布及样品电阻率的变化的研究结果也与这个模型矛盾。另外的模型认为离子注入产生的损伤在退火过程中释放出大量的缺陷,导致扩散的增强^[6-15]。M. Servideri^[8,9]讨论了注入损伤的退火行为与增强扩散的关系,认为注入产生点缺陷群,退火过程中释放出大量的点缺陷,导致扩散增强,并且这个效应的强弱与掺杂原子和缺陷的相对位置有关。L. C. Hopkins^[16]曾用化学腐蚀的方法去掉表面高损伤层后研究发现仍然存在增强扩散,但这一结果并不能排除损伤对增强扩散的贡献,因为损伤可能延伸到材料深部,而且表面损伤也不可能完全被去掉。

通常计算增强扩散系数采用拟合法,即假定一个常数的扩散系数,利用杂质浓度的初始分布对扩散方程进行数值积分,求出扩散后的浓度分布并与实验结果比较,从而确定出增强扩散系数的值^[15],或者用高斯分布对注入杂质的扩散前后的分布进行数值拟合,确定出扩散系数^[17]。但这后一方法通常仅适用于浓度分布峰值附近的区域。由于增强扩散与注入产生的缺陷及相对位置有关,应该认为增强扩散系数是时间和位置的函数。本文利用离子注入杂质在退火过程中的浓度分布 SIMS 数据,计算了扩散系数随位置的分布,并以注入产生缺陷的分布和运动解释了离子注入硼的这种增强扩散分布。

二、计算方法

以一维扩散方程描写在深度上的增强扩散：

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

式中 $N(x, t)$ 为杂质浓度分布， $D(x, t)$ 是随时间和位置变化的扩散系数。将(1)式两端在 (x_0, ∞) 区间对 x 积分，并利用条件

$$\left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow \infty} = 0$$

有：

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_0}^{\infty} N(x, t) dx = -D(x_0, t) \left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0} \quad (2)$$

定义浓度剖面分布面积：

$$S(x_0, t) = \int_0^{x_0} N(x, t) dx \quad (3)$$

表示在 t 时刻分布在深度 x_0 以内表面层的掺杂剂量。显然， $S(\infty, t) = \phi(t)$ 为 t 时刻的总掺杂剂量。将(2)式左端的积分限作变换：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_0}^{\infty} N(x, t) dx &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{x_0}^0 N(x, t) dx + \int_0^{\infty} N(x, t) dx \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial t} [\phi(t) - S(x_0, t)] \end{aligned} \quad (4)$$

代入(2)式有：

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi(t) - S(x_0, t)] = -D(x_0, t) \left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0} \quad (5)$$

即：

$$D(x_0, t) = \frac{\partial [\phi(t) - S(x_0, t)]}{\partial t} / \left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0} \quad (6)$$

由此式可看出， t 时刻在 x_0 位置的扩散系数值可由掺杂总剂量与杂质剖面分布面积之差的变化速率与该位置处的浓度梯度的比值确定。于是利用此式可计算扩散系数的深度分布以及随时间的变化。

为便于实际计算，考虑扩散过程中间隔为 Δt 的两个时刻，假设 Δt 较小，则将(5)式两端在这个时间间隔内对时间积分：

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} [\phi(t) - S(x_0, t)] dt = - \int_t^{t+\Delta t} D(x_0, t) \left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0} dt$$

即有：

$$\begin{aligned} \phi(t + \Delta t) - \phi(t) - S(x_0, t) + S(x_0, t + \Delta t) \\ = - \int_t^{t+\Delta t} D(x_0, t) \left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0} dt \end{aligned} \quad (7)$$

由中值定理，(7)式成为：

$$\phi(t + \Delta t) - \phi(t) = S(x_0, t) + S(x_0, t + \Delta t) = -D(x_0, t') \frac{\partial N(x, t')}{\partial x} \Big|_{x_0} \Delta t \quad (8)$$

式中 $t \leq t' \leq t + \Delta t$. 这样我们可以计算在 Δt 时间内的有效平均扩散系数。作一种近似,(8)式中的浓度梯度值可由下式代替:

$$\frac{\partial N(x, t')}{\partial x} \Big|_{x_0} \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial N(x, t + \Delta t)}{\partial x} \right] \Big|_{x_0} \quad (9)$$

这样(8)式可以写为:

$$D(x_0, t') \simeq \frac{S(x_0, t + \Delta t) - S(x_0, t) + \phi(t) - \phi(t + \Delta t)}{\frac{1}{2} \Delta t \left[\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial N(x, t + \Delta t)}{\partial x} \right] \Big|_{x_0}} \quad (10a)$$

若已知扩散过程中两个时刻的杂质的浓度分布，则用(10)式可以逐点计算出这两个时刻间的有效平均扩散系数的分布。当这两个时刻很接近，即 Δt 很小时，计算出的有效平均扩散系数就接近于“瞬时”值，分布也就接近“瞬时”的分布。

对于某些杂质或某些条件下，如快速热退火过程，可以不计离子注入后杂质在退火过程中的挥发，则总掺杂剂量在退火过程中将保持不变，即 $\phi(t) = \phi(t + \Delta t)$ ，(10a) 式就成为：

$$D(x_0, t') = \frac{S(x_0, t + \Delta t) - S(x_0, t)}{\frac{1}{2} \Delta t \left[\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial N(x, t + \Delta t)}{\partial x} \right] \Big|_{x_0}} \quad (10b)$$

三、结果与讨论

利用注入杂质原子在热退火过程中的 SIMS 分布数据，用拉格朗日插值计算数值积分以及数值导数，再根据(10)式逐点计算离子注入硼原子在退火过程中的增强扩散系数随深度的分布。结果如图 1 所示，其中 SIMS 数据取自文献 [6]。计算出来的各点扩散系数值通常具有一定的离散，这可能是由于 SIMS 取值误差和数值导数不连续造成的计算误差。但从图 1 的结果仍可看出增强扩散系数在深度上的分布规律。提高浓度分布数据的准确性，以及适当改进数值计算方法，可以改善计算的扩散系数的分布连续性和准确性。

从图 1 看出，离子注入掺杂的硼原子的增强扩散系数在深度上呈现一定的分布，可划分为三个区域：(1) 在射程 R_p 以内的浅表区，增强扩散系数随深度而增加；(2) 在注入杂质浓度分布峰值附近，增强扩散系数减小，出现极小值；(3) 在深部区域，增强扩散系数增加，增强扩散最显著。R. B. Fair^[11]曾经将增强扩散在深度上作了类似的分区，他认为浓度分布峰值附近的高损伤层没有增强扩散，增强扩散只发生在高损伤层两边，即浅表区和深部区域。这个模型与本文计算出的扩散系数在深度上的分布的结果一致。

由于固体中杂质的扩散过程通常借助于缺陷运动，因此增强扩散系数的分布反映了离子注入产生缺陷的分布及其在热退火过程中的运动。M. Servidori^[8,9]等人曾用 X 射线衍射的方法分析了离子注入硅中产生的缺陷分布及退火行为，其结果与 L. Meda^[12]的模型相符。根据他们的结果，可以定性地说明本文计算的离子注入的硼原子的增强扩散系

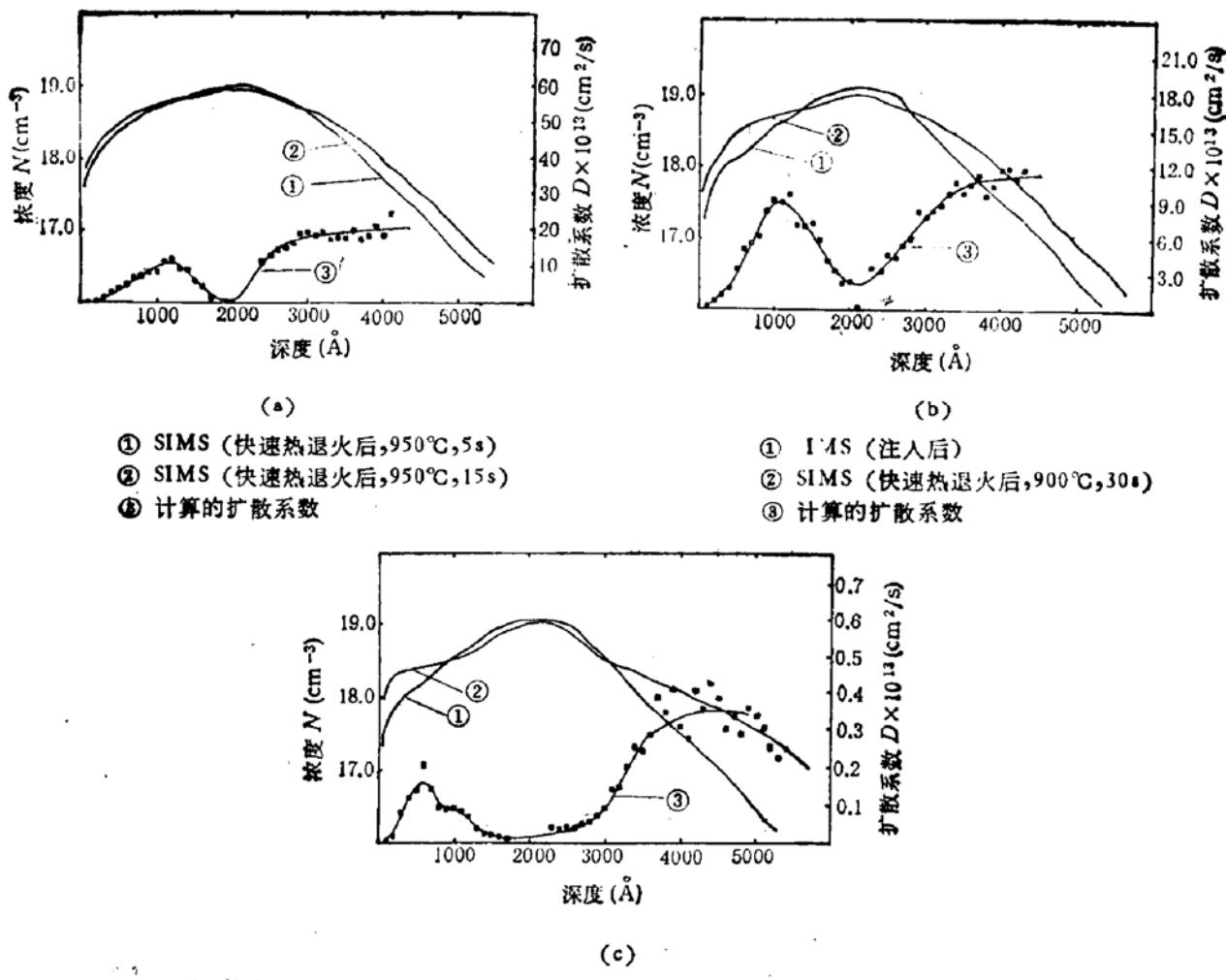


图 1 计算的硼增强扩散有效扩散系数随深度的分布

■ 为计算点, 浓度分布的 SIMS 数据取自文献 [6], B^+ 离子注入硅, 能量 60keV, 剂量 $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$

数的分布。对于注入剂量低于非晶化阈值的样品, 注入产生两种缺陷, 一为主要在表面和射程 R_p 之间的, 在中等温度就可恢复的非晶化岛, 另一种为在射程 R_p 附近的主要以点缺陷和点缺陷群(Cluster)形式存在, 需要较高的温度恢复。退火时, 较小的点缺陷群消融, 同时释放出大量的点缺陷, 增强了扩散运动。高浓度的点缺陷则塌陷形成更为稳定的点缺陷群或位错, 同时对点缺陷还有吸收作用, 使退火过程减慢, 因而无扩散增强作用。所以在浓度峰值附近的高损伤区, 增强扩散系数较小。在浅表区, 应力分析表明靠近表面注入产生空位缺陷, 而接近高损伤层则存在间隙缺陷。由于硼原子在硅中的扩散机制主要是间隙式的^[18], 因此, 在浅表区, 增强扩散系数随深度而增加。另外, 间隙和空位的相互作用也是表面附近的增强扩散减弱的可能原因。

对于剂量高于非晶化阈值的样品, 热退火过程中非晶层的固相外延速度很快, 如在 900°C 下可估计为 10000 Å/s ^[19], 因此可以不考虑非晶层内的扩散对增强扩散的贡献。固相外延后, 在原非晶-晶界面附近留下一个高浓度的缺陷层, 而在表面附近留下一个富空位层。进一步的退火使高浓度缺陷层中的点缺陷聚集成大的点缺陷群, 大的点缺陷群塌陷成位错, 因此在原非晶-晶界面附近的区域增强扩散较小。点缺陷从这个层向外扩散导

致两边的扩散增强,而表面的空位与间隙的相互作用也使得表面附近增强扩散减弱,因而浅表区的增强扩散系数也随深度而增加。可见,对于剂量高于非晶化阈值的样品,其增强扩散系数的分布将与低于非晶化阈值的注入样品相似。

离子注入产生的损伤和缺陷是增强扩散的主要机制,因此,随着退火时间的增加,剩余缺陷的消失,增强扩散将趋于结束,从而表现出具有一个“寿命”^[6]。如果已知退火过程中各个时刻的浓度分布,例如测量各种时间下退火的杂质原子 SIMS 分布,这可以通过快速热退火的方法(RTA)进行,用本文的方法计算各相邻时刻间的有效平均扩散系数分布,从而计算出随时间的变化。这有助于进一步研究增强扩散运动的动态过程。

四、结语

用硅中离子注入掺杂原子硼在退火过程中的 SIMS 分布数据进行数值积分和导数,计算了注入掺杂硼原子的增强扩散系数在深度上的分布。可以分为三个区域:浅表区,增强扩散系数随深度增加;浓度峰值附近高损伤区,增强扩散减小;深部区域,增强扩散较显著。增强扩散系数的这种分布,反映了离子注入产生的缺陷分布及其热运动规律。此外,利用本文的方法,可以计算出扩散系数随时间的变化,有助于研究增强扩散运动的动态过程。

参 考 文 献

- [1] R. T. Hodgson, V. R. Deline, and S. Mader, *Appl. Phys. Lett.*, **44**, 589(1984).
- [2] J. B. Lasky, *J. Appl. Phys.*, **54**, 5009(1983).
- [3] W. Holzker, H. Werner, D. Osthoek, and H. deGraaf, *Appl. Phys.*, **2**, 265(1973).
- [4] A. Chu, J. F. Gibbons, *Ion Implantation in Semiconductor*, edited by F. Chernous, J. A. Borkers, D. K. Brice, p. 711(1977).
- [5] K. Cho, M. Numan, T. Finstad, W. Chu, J. Lui, and J. Wortman, *Appl. Phys. Lett.*, **47**, 1321(1985).
- [6] A. E. Michel, W. Rausch, P. A. Ronsheim, and R. H. Kastl, *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 416(1987).
- [7] R. Kalish, T. O. Sedgwick, S. Mader, and S. Shatas, *Appl. Phys. Lett.*, **44**, 107(1984).
- [8] M. Servidori, R. Augelucci, F. Cembaldi, P. Negri, S. Solmi, P. Zaumseil, and U. Winter, *J. Appl. Phys.*, **51**, 1834(1987).
- [9] M. Servidori, Z. Sourek, and S. Solmi, *J. Appl. Phys.*, **62**, 1732(1987).
- [10] J. Naragan, O. W. Holland, R. E. Eby, J. J. Wortman, V. Ozguz, and G. A. Roggonyi, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 957(1983).
- [11] R. B. Fair, J. J. Wortman, and J. Lui, *J. Electrochem. Soc.*, **131**, 2387(1984).
- [12] G. S. Oehrlein, S. A. Cohen, and T. O. Sedgwick, *Appl. Phys. Lett.*, **45**, 417(1984).
- [13] A. Aragniato, S. Suimaraes, S. Solmi, R. Kogler, and E. Wieser, *Nucl. Instrum. Methods*, **B19/20**, 512(1987).
- [14] R. Kogler, E. Wieser, M. Voelckow, and G. Otto, *Nucl. Instrum. Methods*, **B19/20**, 516(1987).
- [15] L. C. Hopkins, T. E. Seidel, J. S. Williams, and J. C. Bean, *J. Electrochem. Soc.*, **132**, 2035(1985).
- [16] M. E. Lunnon, J. T. Chen, and J. E. Baker, *Appl. Phys. Lett.*, **46**, 35(1985).
- [17] L. Meda, G. F. Cerofolini, and G. Ottaviani, *Nucl. Instrum. Methods*, **B19/20**, 454(1987).
- [18] P. M. Babey, R. W. Dutton, *Semiconductor Silicon*, p. 571(1986).
- [19] J. J. Grab, A. Grab, *J. Appl. Phys.*, **62**, 1788(1987).

Enhanced Diffusivity Profiles of Atoms Doped by Implantation in Silicon

Zeng Lun

(South-West Institute of Technical Physics, Chengdu)

Abstract

The enhanced diffusivity profiles of dopants implanted in silicon have been calculated using the concentration data of SIMS during thermal annealing process. Such profile is responsible for the distribution and thermal characteristic of damage and defects produced by ion implantation.

KEY WORDS: Ion implantation, Enhanced diffusion, Diffusivity profile, Damage