

氟在多晶硅栅中迁移特性的分析与模拟*

张廷庆 李建军 刘家璐

(西安电子科技大学微电子所 西安 710071)

赵元富

(骊山微电子研究所 临潼 710600)

摘要 在深入分析氟在多晶硅栅中迁移特性的基础上,建立了氟在多晶硅栅中的迁移方程.采用有限差分法,模拟了氟在多晶硅栅中的分布,模拟结果与实验符合得很好.给出了氟在多晶硅栅中的发射系数 e 约为 $6 \times 10^{-2}/s$, 氟在晶粒间界的扩散系数 $D_b = 9 \times 10^{-12} \exp(-0.895/kT)$ 和氟在 Poly-Si/SiO₂ 界面的吸收系数 S_1 与温度的变化关系.

PACC: 6170T, 6170A, 6170W

1 引言

在多晶硅栅中引入适量的氟,不但可以增强MOS器件的抗热电子能力^[1,2],而且可以加固栅介质,提高MOS器件抗 γ 辐射性能^[3,4].T seng等^[5]应用网络扩散方法模拟了氟在多晶硅栅中的迁移特性,但在SiO₂中的模拟结果与实验并不相符,而氟在SiO₂中分布的模拟正确与否直接关系到MOS器件抗热电子能力和抗 γ 辐射性能的提高,因此深入分析和正确模拟氟在多晶硅栅中的迁移特性就显得特别重要.本文在深入分析氟在多晶硅栅中迁移特性的基础上,建立了氟在多晶硅栅中的迁移方程.采用有限差分法,模拟了氟在多晶硅栅中的分布,模拟结果与实验结果符合得很好.

2 氟在多晶硅栅中迁移特性的分析

F⁺注入多晶硅栅热退火后F在多晶硅栅中的典型SMS分布如图1所示.可以看到,F在多晶硅栅中的分布是比较复杂的.退火前,注入到多晶硅中的F遵守高斯分布.高温退火

* 国家自然科学基金资助课题

张廷庆 男,教授,主要从事半导体集成电路、半导体器件物理的教学与科研工作

刘家璐 女,副教授,主要从事微电子技术的教学与科研工作

1997-03-17 收到,1997-06-27 定稿

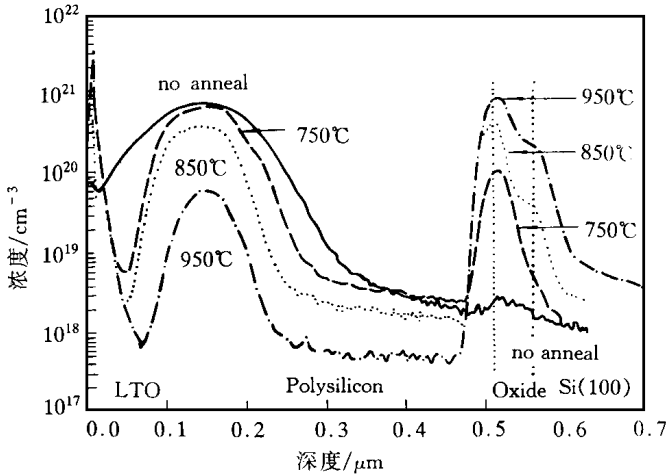


图1 60keV、 $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-2} \text{F}^+$ 注入多晶硅栅在不同温度下退火20分的SMS分布

后,随着退火温度的升高,F注入峰的高度不断下降,分布宽度不断变窄.位于注入峰外侧的F的一部分已迁移到多晶硅表面外,而位于注入峰内侧的F的一部分则通过多晶硅已迁移到 SiO_2 中,并在Poly-Si/ SiO_2 界面形成一个较高的F峰,在 SiO_2/Si 界面形成一个较小的F峰. SiO_2 界面上这两个F峰则随退火温度的升高而升高.

在分析上述F在多晶硅栅中迁移特性时,有两点需要着重考虑:多晶硅栅的结构特点;F的特殊性质.

多晶硅栅通常指 Poly-Si/ SiO_2/Si 结构.它除在 Si 上热生长数十纳米厚的 SiO_2 和低温淀积数百纳米厚的多晶硅外,还应包括 Poly-Si/ SiO_2 和 SiO_2/Si 两个界面.多晶硅在结构上主要由晶粒和晶粒间界组成,如图 2 所示. F 在晶粒内的扩散与在单晶硅内类同.晶粒间界是一种无定形硅,通常为几个原子层,远小于晶粒的厚度. F 在晶粒间界的扩散远大于在晶粒内的扩散,约快 3~4 个数量级. SiO_2 是一种无定形网络结构. F 在 SiO_2 中的扩散与在单晶硅中一样,也遵循相同的扩散规律. Poly-Si/ SiO_2 界面是由多晶硅淀积在 SiO_2 上形成的,由于 Poly-Si 与 SiO_2 在结构上不匹配,因此在界面上存在着大量的缺陷. SiO_2/Si 界面是由 Si 热氧化生长 SiO_2 形成的,在界面包含大量的结构缺陷和悬挂键.

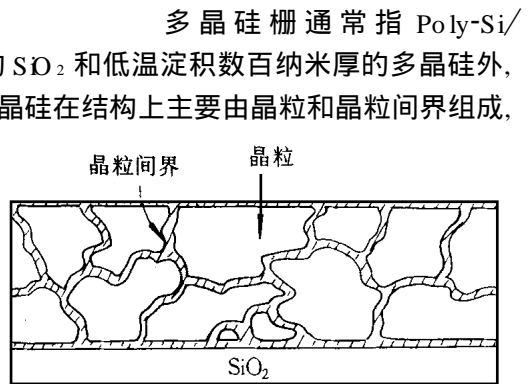


图2 多晶硅结构示意图

F 是一种电负性很强的元素.它在多晶硅栅中有两个独特的特点:1)它在单晶硅中的固溶度极低,因此注入到多晶硅中的 F 原子,在高温退火时,将以极快的速度从晶粒内迁移到晶粒间界,一般称之为 F 的发射;2)F 具有向晶体损伤、缺陷聚集的性质^[6],因此注入损伤、界面缺陷在高温退火时具有吸收 F 原子的本领,一般称之为 F 的吸收.

因此在分析 F 在多晶硅栅中的迁移特性时,除了要考虑 F 在晶粒、晶粒间界和 SiO_2 内的扩散外,还应考虑 F 在晶粒与晶粒间界之间和两个界面处的发射和吸收.

从 F 的扩散考虑,由于 F 在晶粒间界的扩散远比在晶粒内的扩散快,因此 F 在晶粒内的扩散可忽略,仅在晶粒间界以极快的速度迁移;从 F 的发射和吸收考虑,由于 F 的发射比吸收大得多^[5],因此只考虑 F 从晶粒内向晶粒间界的发射.在高温退火时,注入的 F 从晶粒内向晶粒间界发射.发射到晶粒间界的 F,一部分通过晶粒间界很快地扩散出多晶硅表面外,一部分通过晶粒间界很快地向 Poly-Si/ SiO_2 界面扩散,致使 F 注入峰高度降低,分布宽度变窄.退火温度升高,F 的发射增加,F 在晶粒间界的扩散加快,结果造成 F 注入峰高度不

断降低, 分布宽度不断变窄, 如图 1 中 F 在多晶硅中的分布。通过晶粒间界扩散到 Poly-Si/ SiO_2 界面的 F, 被界面的缺陷所吸收, 因而形成了 Poly-Si/ SiO_2 界面的 F 峰。在该界面的 F, 高温下又通过 SiO_2 网络扩散到 SiO_2/Si 界面, 被该界面的缺陷所吸收, 因而又形成了 SiO_2/Si 界面的 F 峰。显然, 这两个界面的吸收随温度的上升而增加, 因而 SiO_2 界面上的这两个 F 峰随退火温度的上升而升高。由于 Poly-Si/ SiO_2 界面是由多晶硅淀积在 SiO_2 上形成的, 它比硅热氧化生成的 SiO_2 形成的 SiO_2/Si 界面有更多的缺陷, 因而 Poly-Si/ SiO_2 界面的 F 峰要比 SiO_2/Si 界面的 F 峰要高, 如图 1 中 F 在 SiO_2 中的分布。

3 F 在多晶硅栅中迁移的物理模型和数学方程

为了定量的模拟 F 在多晶硅栅中的迁移特性, 必须在上述定性分析的基础上, 建立相应的物理模型和数学方程

3.1 物理模型

多晶硅栅几何结构的一维模型如图 3 所示。假定多晶硅晶粒为长方体, 它的厚度即为淀积的多晶硅的膜厚, 用 d 表示, 它的平均宽度即为晶粒的大小, 用 L_g 表示, 晶粒间界用 L_b 表示。

a) F 在晶粒内的扩散

由于在结构上, 晶粒与单晶硅类同, 因此可认为 F 在晶粒内的扩散与在单晶硅中的扩散是一样的。F 在晶粒内的杂质浓度、扩散系数分别用 C_b, D_g 表示。

b) F 沿晶粒间界的扩散

F 在晶粒内扩散的同时, 也必然沿着晶粒间界进行扩散。由于 F 在晶粒间界的扩散远大于在晶粒内的扩散, 因此一般称 F 在晶粒内的扩散为慢扩散, F 在晶粒间界的扩散为快扩散。F 在晶粒间界的杂质浓度、扩散系数分别用 C_b, D_b 表示。

c) F 在晶粒与晶粒间界之间的发射和吸收

由于 F 的特殊性质, 在退火过程中, 注入层内的 F 要向表面和晶粒间界发射, 其发射系数用 e 表示。但是, 晶粒间界所能容纳的杂质总量是有限的, 因此发射是否成功, 还要受晶粒间界所能容纳的 F 的最大浓度的限制。若 C_{bmax} 表示晶粒间界所能容纳的 F 的最大浓度, 则 $\frac{C_{bmax} - C_b}{C_{bmax}}$ 表示发射能否成功的几率。在从晶粒向晶粒间界发射的同时, 晶粒也要从晶粒间界吸收一部分 F, 其吸收系数用 a 表示。但是, 晶粒对 F 的吸收远小于对 F 的发射, 一般情况下, 可以忽略不计。

d) F 在 Poly-Si/ SiO_2 界面的吸收

从晶粒发射的 F 的一部分被 Poly-Si/ SiO_2 界面吸收形成 F 峰, 其吸收系数用 S_1 来描述, F 在 Poly-Si/ SiO_2 界面的浓度则用 C_{s1} 表示。

e) F 在 SiO_2 中的扩散

Poly-Si/ SiO_2 界面吸收的 F, 在高温下通过 SiO_2 向 SiO_2/Si 界面扩散, 其扩散系数用

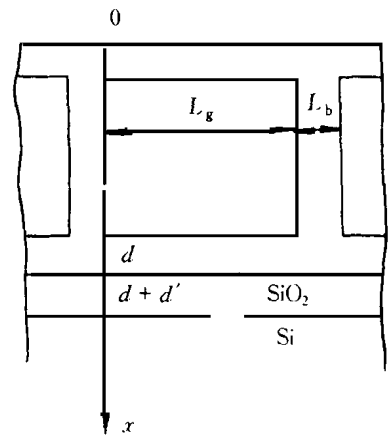


图 3 多晶硅栅几何结构的一维模型

D_{SiO_2} 表示

f) F 在 SiO_2/Si 界面的吸收

通过 SiO_2 扩散到 SiO_2/Si 界面的 F 被界面吸收形成另一个 F 峰, 其吸收系数用 S_2 来描述, F 在 SiO_2/Si 界面的浓度则用 C_{SiO_2} 表示

g) F 在 Si 中的扩散

SiO_2/Si 界面吸收的 F 在高温下向 Si 中扩散, 扩散系数仍为 D_g

3.2 数学方程

在上述物理模型的基础上, F 在多晶硅、 SiO_2 和 Si 中的迁移方程分别如下。

a) 多晶硅部分

在一维扩散方程的基础上, 还须考虑晶粒与晶粒间界之间的发射和吸收, Poly-Si/ SiO_2 界面的吸收以及晶粒与晶粒间界的宽度比和晶粒间界最大固溶度的限制, 于是 F 在多晶硅中及 Poly-Si/ SiO_2 界面的迁移方程如下:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 C_g}{\partial x^2} - eC_g \frac{C_{\text{bmax}} - C_b}{C_{\text{bmax}}} + aC_b \frac{L_b}{L_g} \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b}{\partial x^2} + eC_g \frac{L_b}{L_g} \times \frac{C_{\text{bmax}} - C_b}{C_{\text{bmax}}} - aC_b - S_1 C_b \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{\text{Si}}}{\partial t} = \frac{d}{d-w} S_1 C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} dx \quad (3)$$

$$C_T = C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} + C_g \frac{L_g}{L_b + L_g} \quad (4)$$

式中 w 为 Poly-Si/ SiO_2 界面的吸收长度, 与温度有关; C_T 为 F 在多晶硅中的表观浓度。忽略 F 在晶粒内的慢扩散和晶粒对 F 的吸收, 即 $D_g = 0, a = 0$, 则上述方程可简化为:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = - eC_g \frac{C_{\text{bmax}} - C_b}{C_{\text{bmax}}} \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b}{\partial x^2} + eC_b \frac{L_b}{L_g} \times \frac{C_{\text{bmax}} - C_b}{C_{\text{bmax}}} - S_1 C_b \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_{\text{Si}}}{\partial t} = \frac{d}{d-w} S_1 C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} dx \quad (7)$$

$$C_T = C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} + C_g \frac{L_g}{L_b + L_g} \quad (8)$$

b) SiO_2 部分

在一维扩散方程的基础上, 还须考虑到 SiO_2/Si 界面的吸收, 于是 F 在 SiO_2 中及 SiO_2/Si 界面的迁移方程如下:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = D_{\text{SiO}_2} \frac{\partial^2 C_T}{\partial x^2} - S_2 C_T \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_{\text{SiO}_2}}{\partial t} = \frac{d+d'}{d} S_2 C_T dx + eC_T \quad (10)$$

式中 d 为 SiO_2 膜厚度

c) Si 部分

F 在 Si 中的迁移方程如下:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 C_T}{\partial x^2} - eC_T \tag{11}$$

方程(5~ 11)是一组简化的 F 在多晶硅栅中的迁移方程, 初始条件和边界条件分别如下.

初始条件:

F 在多晶硅中的初始分布为高斯分布:

$$C(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} \exp\left[-\frac{(X - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \tag{12}$$

式中 D 为 F 的注入剂量; R_p 和 ΔR_p 分别为注入离子的平均投影射程和投影射程的标准偏差, 由 F 的注入能量决定

边界条件:

$$X = 0, \quad \frac{\partial C_{\text{Si}}}{\partial a} = \int_0^{R_p} S_i C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} dx \tag{13}$$

$$X > d + d', \quad C_T = 0 \tag{14}$$

4 结论模拟及结果分析

上述方程(5~ 14)采用龙格-库塔方法将其离散 选择时间步长 Δt 为 $\frac{1}{8}$ 秒, 距离步长 ΔX

为 10nm, 通过求解上述微分方程, 就可模拟出退火后 F 在多晶硅栅中的分布 方程中含有的一些描述 F 在多晶硅栅中迁移过程的系数, 在模拟时, 通过模拟曲线与实验曲线反复拟合的方法给出 整个模拟程序用 C 语言编写

图 4 是注入能量为 60keV、注入剂量为 $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-2} \text{F}^+$ 注入多晶硅栅在 950 退火 20 分钟后的模拟结果 可以看到, 模拟结果与实验结果符合得很好 在图 4 中还给出了 Tseng 等的模拟结果 可以看到在 Tseng 等的模拟结果

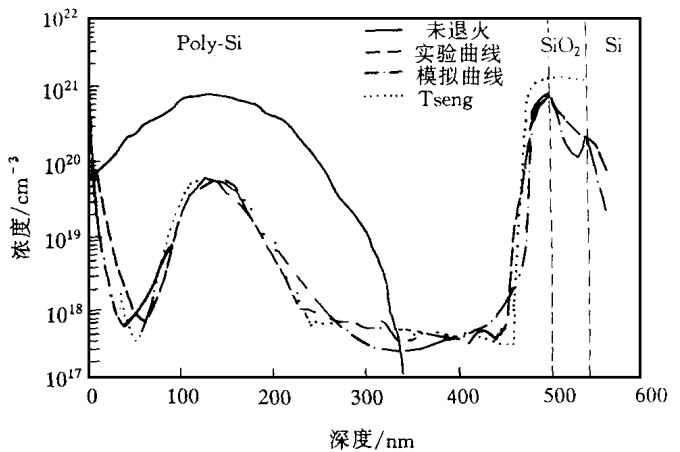


图 4 60keV、 $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-2} \text{F}^+$ 注入多晶硅栅 950 、退火 20 分的模拟结果与实验结果

中, F 在 SiO_2 中和 $\text{Poly-Si}/\text{SiO}_2$, SiO_2/Si 两个界面上的分布与实验结果并不相符, 这是因为他们在方程中没有考虑 F 在 SiO_2 两个界面上的吸收

图 5 是 60keV 、 $1 \times 10^{16}\text{cm}^{-2}\text{F}^+$ 注入多晶硅栅在不同温度下退火 20 分钟的模拟结果 可以看到, 在多晶硅中, F 峰随退火温度增加而降低, 分布宽度随退火温度增加而变窄; 在 SiO_2 中和两个界面上, F 峰随退火温度增加而上升. 该模拟结果与图 1 的 SMS 实测结果符合得很好.

在上述模拟中, 我们还得到了与 F 迁移特性有关的几个常数的数值和随温度的变化关系, 主要是:

- 1) F 在多晶硅中的发射系数 $e \sim 6 \times 10^{-2}/\text{s}$;
- 2) F 在多晶硅晶粒间界的扩散系数 $D_b = 9 \times 10^{-12} \exp(-0.895/kT)$;
- 3) F 在 $\text{Poly-Si}/\text{SiO}_2$ 界面的吸收系数 S_1 随温度的变化关系如图 6 所示

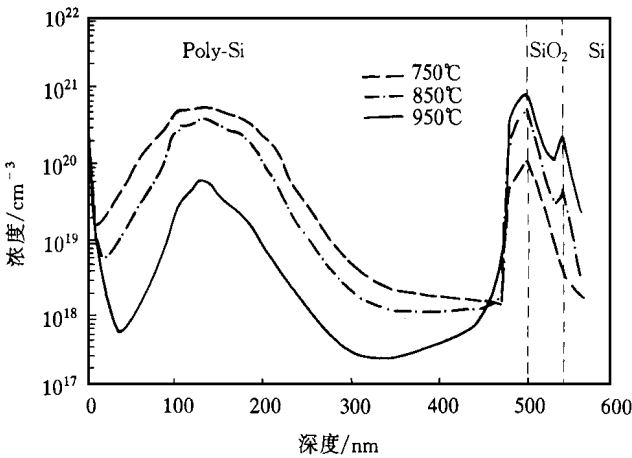


图 5 60keV 、 $1 \times 10^{16}\text{cm}^{-2}\text{F}^+$ 注入多晶硅栅在不同温度下退火 20 分的模拟结果

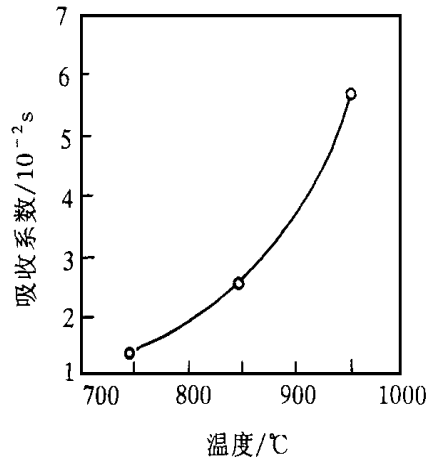


图 6 F 在 $\text{Poly-Si}/\text{SiO}_2$ 界面的吸收系数与温度的关系

参 考 文 献

- [1] Y. Nishioka, K. Ohya, Y. Ohji *et al* , IEEE Electron Device Lett , 1989, **10**: 141~ 143
- [2] Y. Nishioka, E. F. da Silva, Y. Wang and T. P. M. a. , IEEE Electron Device Lett , 1988, **9**: 38~ 40
- [3] Y. Wang, Y. Nishioka, T. P. M. a and R. C. Barker, Appl Phys Lett , 1988, **52**: 573~ 575
- [4] 张廷庆, 刘家璐, 张正选, 等, 电子学报, 1995, **23**: 88~ 91.
- [5] H. H. Tseng, M. Orłowski, P. J. Tobin and R. L. Hance, IEEE Electron Device Lett , 1992, **13**: 14~ 16
- [6] M. Y. Tsai, D. S. Day and B. G. Streetman, J. Appl Phys , 1979, **50**: 188~ 192

Analysis and Simulation of Migration Characteristics of Fluorine in Polysilicon Gate

Zhang Tingqing, Li Jianjun, Liu Jialu

(Microelectronics Institute, Xiidian University, Xi'an 710071)

Zhao Yuanfu

(Lishan Microelectronics Institute, Lintong 710600)

Received 17 March 1997, revised manuscript received 27 June 1997

Abstract The migration equation of fluorine in polysilicon gate is presented on the basis of analysis for the migration characteristics of fluorine in polysilicon gate. The distribution of fluorine in polysilicon gate is simulated by the finite difference method. The simulation results are in good agreement with the experimental results. The emission coefficient of fluorine in polysilicon $e \sim 6 \times 10^{-2}/s$, the diffusion coefficient of fluorine in grain boundary $D_b = 9 \times 10^{-12} \exp(-0.895/kT)$ and the relation between the absorption coefficient of fluorine in Poly-Si/SiO₂ interface S_1 and the temperature are given.

PACC: 6170T, 6170A, 6170W