

# 离子注入形成 SIMOX 与 SIMNI 结构的计算机模拟

施左宇<sup>a</sup> 林成鲁<sup>a</sup> 朱文化<sup>a</sup> P. L. F. Hemment<sup>b</sup>

U. Bussmann<sup>c</sup> 邹世昌<sup>a</sup>

(a 中国科学院上海冶金研究所信息功能材料国家重点实验室 上海 200050)

(b Department of Electronic and Electrical Engineering, University of Surrey, U. K.)

(c Institute of Physics, University of Dortmund, Germany)

**摘要** 本文报告了硅中注入大剂量 O<sup>+</sup> 或 N<sup>+</sup> 离子形成 SIMOX 或 SIMNI 的计算机模拟结果, 分析了 SIMOX 与 SIMNI 形成的不同机制, 在注氧形成 SIMOX 结构的计算机模拟程序的基础上发展了注氮形成 SIMNI 结构的动态模拟程序。实验与模拟结果符合很好, 验证了现有的理论模型和程序所作的假设。多次注入与退火会减小 SIMOX 上层硅厚度, 而增大 SIMNI 的上层硅厚度。低能注入可以获得良好的 SOI 材料, 而且可以降低注入剂量。

**PACC:** 6170T, 6180J, 7280, 7360H, 0270

## 1 引言

通过直接注入氧、氮离子形成的 SIMOX (Separation by IMplantation of Oxygen) 和 SIMNI (Separation by IMplantation of NItrogen) 材料制作出的 SOI (Silicon-on-Insulator) 电路与体硅相比有显著的优点, 如抗辐照能力的增强、无 Latch-up 效应、电路速度的提高、电路正常工作温度上限提高(>350℃), 同时简化了工艺, 去掉了阱扩散, 减少了光刻掩模数量, 因此是将来 VLSI 电路最有希望的衬底材料之一<sup>[1]</sup>。近几年, 薄膜 SOI 材料制作的器件由于具有某些突出的优点, 如亚阈值特性的改善、kink 效应与短沟道效应的抑制、电路跨导增大等, 因此如何以离子注入获得上层硅厚度薄(~1000 Å) 的高质量 SOI 材料是个人们关心的问题<sup>[2]</sup>。与此同时, 改善 SOI 材料质量的一个重要问题是进一步减少上层硅缺陷密度, 其中一个有效的途径是采取多次注入与退火<sup>[3]</sup>。为了预言 SOI 材料的优化途径, 对离子注入形成 SOI 材料的过程进行计算机模拟是既有学术意义又有应用需要的重要课题。已有的 IRIS (Implantation of Reactive Ions into Silicon) 程序<sup>[4]</sup>只是对注氧形成的 SIMOX 结构进行了模拟, 但是, 注氮形成 SIMNI 结构有其区别于 SIMOX 的特殊性, 然而却没有见到这方面的文献报道。本文比较研究了离子注入形成 SIMOX 与 SIMNI 材料的不同物理机制, 发展了 IRIS 程序, 首次对注氮

形成 SIMNI 结构进行了计算机模拟, 并给出了低能注入与多次注入获得 SOI 材料的计算机模拟结果。

## 2 形成埋层的物理机构

离子注入形成 SOI 这一课题早在六十年代就有研究。最早的  $\text{SiO}_2$  合成与电特性测量是 M. Natanabe 和 A. Too 在 1966 年完成<sup>[5]</sup>。氧、氮、碳元素化学性质很活泼, 容易与硅原子成键。从化学键能考虑可知: ①  $\text{Si}_3\text{N}_4$  和  $\text{SiO}_2$  可以在注入过程中形成, 只要达到稳定态的势垒能被热激活或缺陷感应所致的势垒降低所克服; ② N-N 键和 C-C 键在高浓度下容易形成; ③ O 和 C 作为固有杂质将在第二相成核中起重要作用。实验结果已证明, 氧注入过程中即会发生化学分凝, 达到  $\text{SiO}_2$  化学配比后将得到平顶氧分布<sup>[6]</sup>。化学剂量比  $\text{SiO}_2$  层两侧 Si 中含有较多的氧, 特别是在埋层与表层硅之间。退火时, 氧向  $\text{SiO}_2$  沉淀层分凝。在较低的注入温度  $T_i$  下(如  $T_i = 400^\circ\text{C}$ ), 氧化物层两侧形成非晶硅层, 经退火变成多晶。在高的  $T_i$  下(如  $T_i = 600^\circ\text{C}$ ), 退火时氧只分凝到化学配比层, 分凝几乎是完全的, 表层是质量很好的单晶 Si, 而且非晶  $\text{SiO}_2$  与单晶硅层界面非常陡。

氮注入时并不发生分凝, 随着注入剂量的增大, 氮的浓度可以大大超过  $\text{Si}_3\text{N}_4$  的化学配比, 氮堆积在已形成的  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层中。1200°C以上的高温退火引起氮的分凝, N/Si 比接近  $\text{Si}_3\text{N}_4$  化学配比的区域分凝成  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层, 富氮区形成氮泡层。AES 分析证实了经 1200°C、2 小时退火的样品中间埋层包含一富氮层<sup>[7]</sup>。这是因为氮在  $\text{Si}_3\text{N}_4$  中扩散系数很小所致。高温退火时,  $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$  沉淀成核, 低的氮扩散速率控制成核生长, 引起生长前沿的不稳定和限制了最高氮浓度处的沉淀物成核。

## 3 模型

IRIS 是快速计算高剂量氧注入表面有  $\text{SiO}_2$  掩蔽或无掩蔽单晶硅及退火后氧分布的计算机模拟程序, 发展后的程序考虑了氮注入的特点, 分析了由于形成  $\text{SiO}_2$  和  $\text{Si}_3\text{N}_4$  埋层导致膨胀、大剂量注入引起的溅射以及 O、N 扩散引起的再分布。

### 3.1 氧或氮的沉积

氧在硅与  $\text{SiO}_2$  中投影射程  $R_p$  以及射程歧离  $\Delta R_p$ , 相差不多。设硅与  $\text{SiO}_2$  密度均为  $2.33 \text{ g/cm}^3$ , 200 keV  $\text{O}^+$  注入硅与  $\text{SiO}_2$  的  $R_p$  都是  $400 \text{ nm}$ ,  $\Delta R_p$  分别为  $92.5 \text{ nm}$  和  $85 \text{ nm}$ 。对应每一增量剂量, 在靶中的沉积分布几乎是不变的, 因此我们用相同能量下氧注入硅的 TRIM<sup>[8]</sup> 结果作为 IRIS 程序的输入文件, 计算氧在靶中的沉积。将靶分成 100 个含有固定硅原子数的小薄片, 沉积前每一小片为相同厚度的纯硅, 注入过程中随着膨胀、溅射与扩散, 每一小片厚度发生变化, 而包含的硅原子数除表面层外都保持不变。

注氮情况有所不同, 氮在硅与氮化硅中  $R_p$  与  $\Delta R_p$  相差甚大, 200 keV 注入氮在 Si 与  $\text{Si}_3\text{N}_4$  中  $R_p$  分别为  $432 \text{ nm}$  与  $321 \text{ nm}$ ,  $\Delta R_p$  分别为  $96 \text{ nm}$  与  $61 \text{ nm}$ , 随着氮化硅层形成, 在注入样品中的  $R_p$  与  $\Delta R_p$  要减小, 因此应对 TRIM 值进行修正, 由于表层

硅中氮含量较少,修正主要在埋层中间,射程变化对上层硅厚度影响不大。

### 3.2 膨胀

硅内部  $\text{SiO}_2$  或  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层形成引起体积膨胀以适应  $\text{SiO}_2$  与  $\text{Si}_3\text{N}_4$  的生长,只允许垂直方向上的膨胀,靶材料相对表面向下偏移,假设  $\text{SiO}_2$  密度为  $2.33 \text{ g/cm}^3$ ,则硅完全氧化膨胀系数为 2.15,未达到化学配比处的膨胀系数由线性插值确定。对注氮,假设氮化硅密度为  $2.8 \text{ g/cm}^3$ ,硅变成  $\text{Si}_3\text{N}_4$  的膨胀系数为 1.04,体积变化不大,随着剂量增加,氮泡形成,体积略有增加,趋于不变,未达化学配比处的膨胀系数也由线性插值确定。

### 3.3 溅射

高剂量离子注入引起的表面刻蚀导致靶材料向上的偏移,不断露出新的表面。对  $200\text{keV}$  氧注入通常使用 0.2 原子/离子的溅射产额。作为比较,TRIM 程序算出的理论溅射产额为 0.15 原子/离子,实验得出多晶硅的刻蚀速率为 0.22 原子/离子,  $\text{SiO}_2$  要溅射得更快。模拟程序由硅与  $\text{SiO}_2$  的溅射产额插值得出当时特定表面氧浓度下的溅射产额。注氮的情况基本相同,溅射产额也由 TRIM 得出。

### 3.4 扩散

氧在硅中固溶度很低( $1200^\circ\text{C}$ 时为  $7 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ ),因此在氧浓度远小于化学配比时,就会发生氧化物淀积。只要有足够的硅原子存在,注入氧立即与之成键,在注入温度下氧分布不会变化,但超过化学配比后,注入氧会产生快速再分布,过剩氧扩散到峰边缘,由于非对称能量淀积分布,辐射增强扩散与氧化,向上界面扩散优先于向下界面扩散。但通过  $\text{SiO}_2$  掩蔽层注入时过剩氧并不完全向上界面扩散,因此程序中设立一“ $r$ ”值代表向上界面与下界面扩散的比例。

注氮的情况完全不同,氮在  $\text{Si}_3\text{N}_4$  中扩散系数极小( $500^\circ\text{C}$ 时为  $2.1 \times 10^{-28}\text{cm}^2/\text{s}$ ),因而在注入温度下( $\sim 600^\circ\text{C}$ )可忽略扩散,过剩氮将堆积而成氮泡,高温退火时氮泡中的过剩氮并不扩散到界面以维持化学配比。

## 4 模拟结果

图 1 是  $200\text{keV}$ 、 $1.4 \times 10^{18}\text{N}^+/\text{cm}^2$  注入 Si 的模拟结果,过剩氮并不发生向界面的扩散,而是在  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层中形成氮泡,  $\text{N/Si}$  比可以超过  $\text{Si}_3\text{N}_4$  化学剂量比  $4/3$ ,模拟退火后( $1200^\circ\text{C}$ 、5h)形成的 SIMNI 结构  $T_{\text{Si}} = 324\text{nm}$ ,  $T_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 248\text{nm}$ ,这与 XTEM 测出的  $T_{\text{Si}} = 340\text{nm}$ 、 $T_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 240\text{nm}$  是符合得较好的<sup>[6]</sup>。

注氧形成的 SIMOX 结构上层硅厚度随剂量增大减小很多,因为形成化学配比层后过剩氧将优先向上界面扩散。这是两种结构的重要区别。

IRIS 可用来预测多次注入与退火的 SIMOX 和 SIMNI 各层厚度。图 2 是  $200\text{keV}$  的  $\text{N}^+$  两次注入与退火的模拟结果注入剂量为  $(1.0 + 0.4) \times 10^{18}\text{N}^+/\text{cm}^2$ ,与上面总剂量相等。多次注入与退火使 SIMNI 上层硅的厚度增加,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  层的厚度相应减小。多次注入模拟上下界面分别为 356nm 和 555 nm,而 SIMOX 结构采用多次注入与退火将使上层硅厚度变薄<sup>[4]</sup>。两者的差异在于形成 SIMOX 结构时,前次注入退火形成的化学配比  $\text{SiO}_2$  层将引起更多的氧向上界面分凝,因而上层硅厚度减小,而 SIMNI 中间埋层超

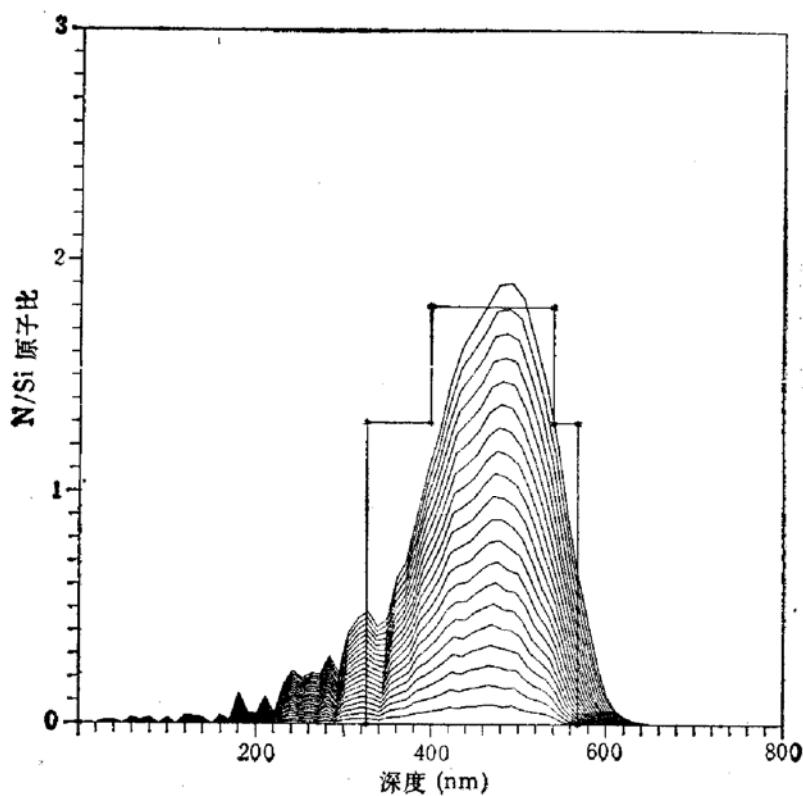


图1 200keV,  $1.4 \times 10^{18} \text{N}^+/\text{cm}^2$  注入 Si 的 IRIS 模拟结果  
虚线为 1200°C, 5h 退火后界面。

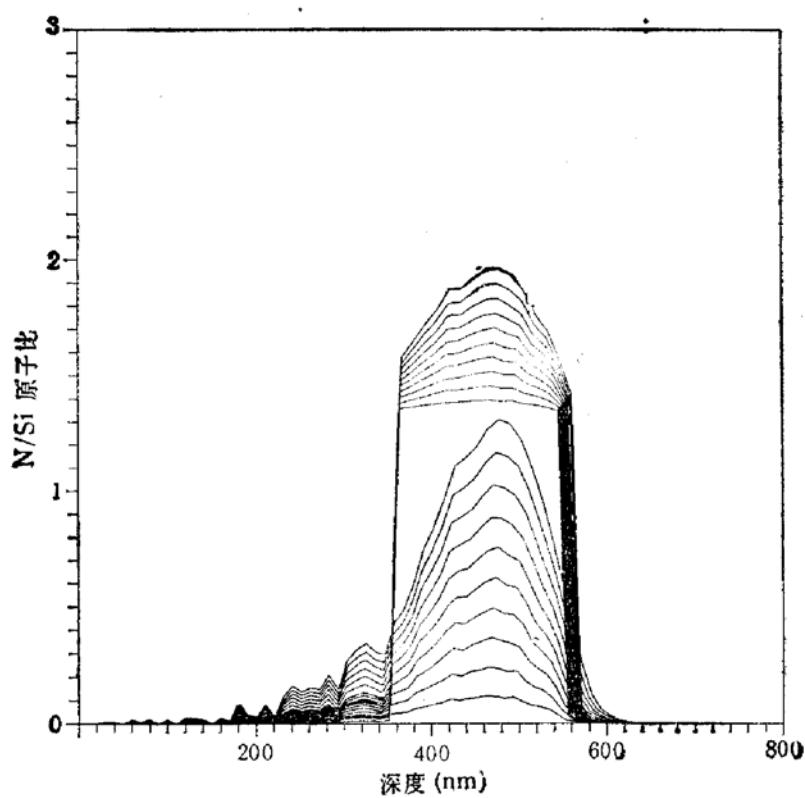


图2 200keV,  $(1.0 + 0.4) \times 10^{18} \text{N}^+/\text{cm}^2$  两次注入硅的 IRIS 模拟结果, 1200°C, 2h 退火

过化学配比的区域不会发生过剩氮的再分布，前次注入与退火形成的新界面使更多的过剩氮“堆积”在埋层中，减少了扩散的氮，因而上层硅厚度增加。

利用 IRIS 程序可以快速模拟 SIMOX 和 SIMNI 的形成过程，因为要注入形成埋

层的剂量在  $10^{18} N^+ / cm^2$  附近, 每注入一片要花几个小时的时间。程序可以避免实际的实验损耗, 直接预言各层的厚度, 只需结合已有数据进行修正即可。图 3 是计算得出 200keV

$N^+$  注入形成 SIMNI 结构上下界面与剂量的关系。随剂量增加, 界面移动趋势减弱, 是因为氮“堆积”之故。

除了能模拟同一能量下多次注入与退火形成的 SOI 结构, IRIS 还可以预言多种能量各种剂量注入同一样品退火后形成的结构。图 4 是先 350keV 注入再 150keV 注入并退火的模拟结果。两次不同能量的注入形成五层结构, 即上层  $\langle 100 \rangle$  单晶硅层, 第一层  $SiO_2$  埋层, 中间  $\langle 100 \rangle$  单晶硅层, 第二层  $SiO_2$  埋层,  $\langle 100 \rangle$  单晶硅衬底。各层厚度分别为:  $T_{Si}^{(1)} = 240 nm$ ,  $T_{SiO_2}^{(1)} = 200 nm$ ,  $T_{Si}^{(2)} = 260 nm$ ,  $T_{SiO_2}^{(2)} = 200 nm$ , 用 RBS/C 测量实际注入样品得到的结果为:  $T_{Si}^{(1)} = 232 nm$ ,  $T_{SiO_2}^{(1)} = 199 nm$ ,  $T_{Si}^{(2)} = 257 nm$ ,  $T_{SiO_2}^{(2)} = 180 nm$ <sup>[7]</sup>,

可见实验与模拟符合得相当好, 多种能量注入可以形成新的 SOI 结构, 研究新型器件与电路。由图 4 还能看出第二次 150keV 注入时, 先形成的深埋层向衬底移动, 这是由于注氧引起的体积膨胀。

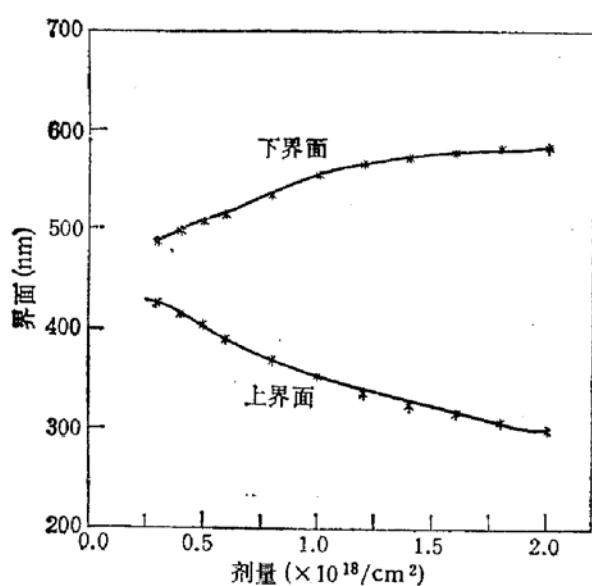


图 3 200keV  $N^+$  注入形成 SIMNI  
结构界面与剂量关系

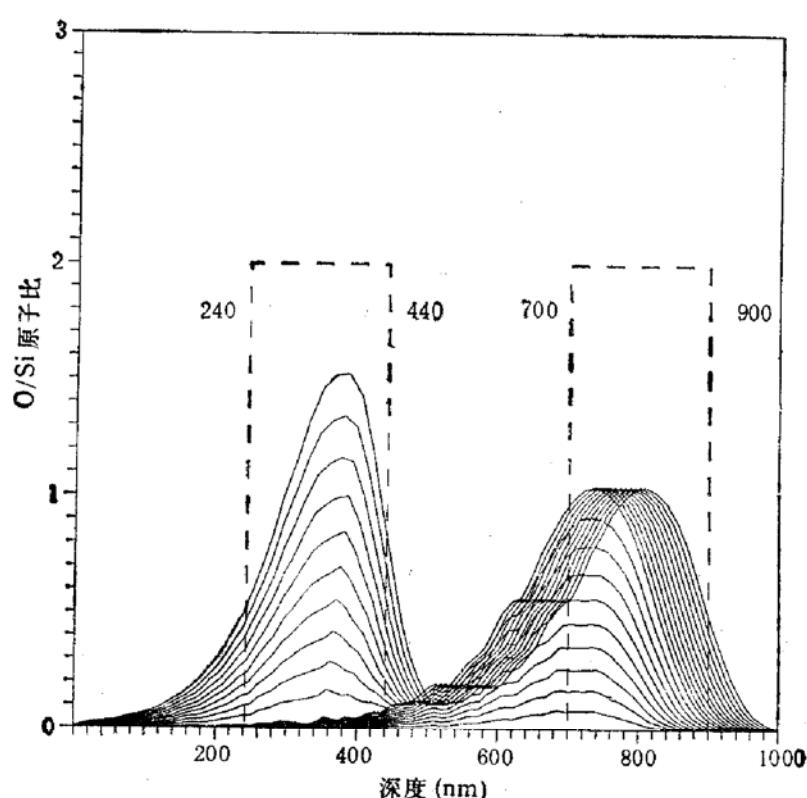


图 4 350keV,  $0.9 \times 10^{18} + 150keV, 0.9 \times 10^{18} O^+ / cm^2$  两次注入形成  
的五层结构的 IRIS 模拟, 1300°C, 6h 退火

低能注入可以获得好的上层硅质量,降低注入剂量,得到可直接制作超薄 SOI 器件的 SIMOX 和 SIMNI 材料,因而是目前广泛研究的课题。因为上层硅较薄,溅射对表面引起的变化较显著,对低能注入的要求也更严格。图 5 是低能氧注入的模拟结果,能量 90keV, 剂量  $1 \times 10^{18} \text{O}^+/\text{cm}^2$ 。模拟得上层硅 100nm, 中间埋层 220 nm, 与实验结果也很接近。

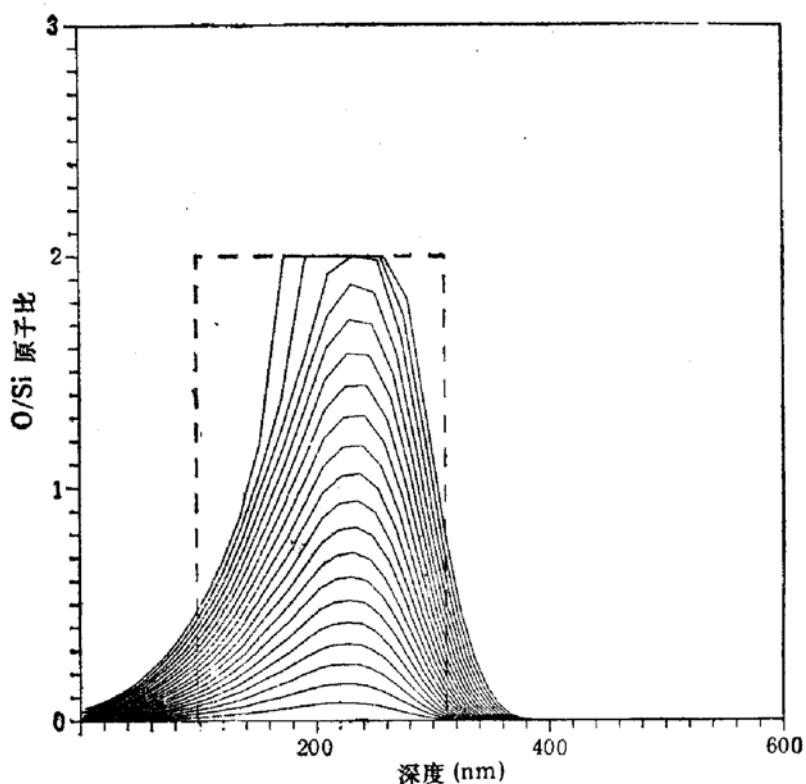


图 5 90keV,  $1 \times 10^{18} \text{O}^+/\text{cm}^2$  注入硅, 1300°C, 6h 退火形成 SIMOX 的模拟结果

## 5 总结

本文的研究结果可以得出:

1. 改进后的 IRIS 程序可以模拟离子注入形成 SIMOX 或 SIMNI 结构, 计算结果与实验值符合很好。SIMOX 与 SIMNI 的形成过程不同, SIMOX 埋层 O/Si 比饱和于  $\text{SiO}_2$  化学配比, 而 SIMNI 埋层中间会由于氮“堆积”形成氮泡;
2. 改善 SOI 上层硅晶体质量所采用的多次注入与退火, SIMOX 上层硅质量会得到改善, 但厚度要薄一些, 而 SIMNI 上层硅要厚一些, 这是由两者不同的形成机制造成的;
3. 低能注入形成的薄层 SOI 其所需的注入剂量要低于常规(如 200keV) SIMOX 所用的剂量, 这样可以缩短生产周期, 降低成本。

## 参 考 文 献

- [1] K. Izumi, Vacuum, 1990, 42:333.
- [2] A. K. Robinson *et al.*, Mater. Science and Engineering, 1992, B12:41.
- [3] J. Margail *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1989, 54:526.
- [4] U. Bussmann and P. L. F Hemment, Nuclear, Instr. and Meth. in Physics Research, 1990, B47.

- [5] M. Wantanabe and A. Togi, Japan J. Appl. Phys., 1966, 737.  
 [6] I. H. Wilson, Ion Beam Modification of Insulators, ELSEVIER, 1987, 245—300.  
 [7] 林成鲁等,中国科学,A辑,1990,9: 976.  
 [8] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, Nuclear. Instr. and Meth., 1980, 174:257.

## Computer Simulation of SIMOX and SIMNI Structures Formed by Ion Implantation

Shi Zuoyu<sup>a</sup>, Lin Chenglu<sup>a</sup>, Zhu Wenhua<sup>a</sup>, P. L. F. Hemment<sup>b</sup>  
U. Bussmann<sup>c</sup> and Zou Shichang<sup>a</sup>

*(a State Key Laboratory of Functional Materials of Informatics  
Shanghai Institute of Metallurgy, The Chinese  
Academy of Sciences, Shanghai 200050)*

*(b Department of Electronic and Electrical Engineering, University of Surrey)  
(c Institute of Physics, University of Dortmund, Germany)*

**Abstract** Computer simulation of implantation of O<sup>+</sup> or N<sup>+</sup> ions into silicon forming SIMOX and SIMNI structure has been reported. The simulation program for SIMOX has been modified in order to be applied in N<sup>+</sup> implantation on the basis of different formation mechanism between SIMOX and SIMNI structures. There is good agreement between experiment and simulation results verifying the theoretical model and presumption in the program. Sequential implantation and annealing will reduce the thickness of top silicon layer of SIMOX but has reverse effect on SIMNI structure. Good crystal quality can be achieved by low energy implantation, in the same time, implantation dose can be decreased.

**PACC:** 6170T, 6180J, 7280, 7360H, 0270