

二维离子注入的改进模型及数值模拟*

徐晨曦 阮刚 王建伟

(复旦大学微电子学研究所, 上海)

1987年1月26日收到

本文提出了一个改进的二维离子注入模型。对于在任意形状掩蔽边界下的离子注入分布,我们在纵向采用联结的半高斯分布或修改过的 Pearson-IV 分布,在横向采用余误差函数分布,并且考虑了在多层掩蔽情况下各种材料阻止本领的不同。利用这一模型发展起来的离子注入模拟器能连续计算多次不同能量、剂量和杂质类型的注入分布,并考虑了多种不同掩蔽边界的影响。通过与其它工艺模拟器的比较,表明我们的模拟器在精度和功能上都有明显的改进。

主题词: 离子注入, IC 工艺, 工艺模型, 二维模拟

一、引 言

离子注入已成为硅集成电路制造中一项必不可少的工艺。离子注入的模拟是集成电路工艺模拟的重要组成部分。集成电路工艺的一维模拟^[1-2]已不能满足集成电路中器件尺寸不断缩小的要求。近年来,集成电路工艺二维模拟的研究成果已不断有所报导^[3-9]。但迄今为止,已有的集成电路工艺二维模拟器或是所用工艺模型尚较粗糙,或是不能处理多层结构和多种掩蔽边界,因而在模拟精度和功能方面还不很理想。

现有集成电路工艺二维模拟器中的离子注入模型同样存在着不够精确的问题。例如:美国斯坦福大学的 SUPRA^[3]其注入离子纵向分布被简单地认为是单一的高斯分布;Bell 实验室的 BICEPS^[4]则认为纵向分布可以用一带拖尾的高斯分布来描述。又如:1985年发表的西德的 COMPOSITE^[5]采用简单高斯分布和 Pearson-IV 分布来描述,它们在不同程度上存在着粗糙性。

此外,大多数离子注入二维模拟器只能处理少数的几种简单边界,并缺乏多层掩蔽处理的功能。

本文提出了一个改进的离子注入二维模型,并报道了使用这一模型开发的一个能处理多种边界形状、并考虑了多层掩蔽作用、能连续计算多次注入分布的二维模拟程序。用我们的离子注入二维模拟程序得出的模拟结果同其它模拟器和已有的文献报道结果相比较表明,我们提出的改进的离子注入二维模型及开发的模拟程序在精度和功能上都有较大的提高。

* 国家自然科学基金资助课题。

以下我们依次论述：改进的离子注入二维模型、数值处理、程序结构概述、模拟结果及比较、结论等部份。

二、改进的离子注入二维模型

1977年 Runge^[6]提出了一个计算任意形状掩模边缘(见图1)的注入离子分布公式:

$$N(x_0, y_0) = \frac{Q_0}{2\pi\Delta R_p\Delta R_{p\perp}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2} - \frac{(x_0 + d(y) - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] dy \quad (1)$$

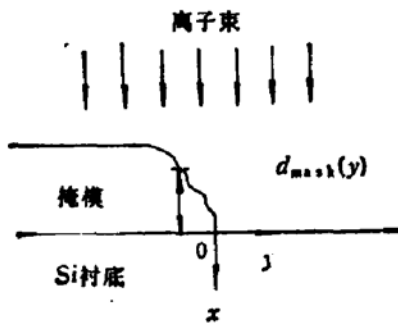


图1 掩模边缘示意图

式中 $N(x_0, y_0)$ 为衬底任意一点 (x_0, y_0) 处的注入离子浓度值, Q_0 为注入离子剂量, R_p 为投影射程, ΔR_p 为投影射程的标准偏差, $\Delta R_{p\perp}$ 为横向标准偏差, $d(y)$ 是 y 处掩模相对于硅衬底的有效掩蔽厚度, 它和实际材料掩蔽厚度 $d_{\text{mask}}(y)$ 的关系为:

$$d(y) = d_{\text{mask}}(y) \times R_{p,\text{Si}}/R_{p,\text{mask}} \quad (2)$$

其中 $R_{p,\text{Si}}$ 和 $R_{p,\text{mask}}$ 分别为硅和实际掩蔽材料的投影射程。

我们认为: (1)式的得出是假设了纵向分布为简单的高斯分布, 因此是较粗糙的。式(1)同斯坦福大学的工艺模拟器 SUPRA 中所用的离子注入二维模型公式极相似, 后者仅仅是用求和来代替(1)式的积分而已。

为此, 我们提出了一个改进的二维模型公式(3), 该式可由(1)式中有关纵向分布的因子用一较精确的一维分布 $c(x, d(y))$ 来替代, 再乘上一横向高斯分布因子, 然后进行一简单的卷积计算得出。

$$N(x_0, y_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p\perp}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(x_0, d(y)) \cdot \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2}\right] dy \quad (3)$$

式中 $c(x_0, d(y))$ 我们采用 SUPREM-II^[3] 中所用的较为精确的一维离子注入模型。即当注入元素是砷、磷、锑时, 注入离子分布用二个联结的半高斯分布来描述; 而当注入元素是硼时, 注入离子分布用一带指数拖尾修正的 Pearson-IV 分布来描述。此外, 我们注意到 SUPREM-II 中处理掩模最多只能一层, 且其材料只限于 SiO_2 , 这已不能适合当今离子注入的需要, 应考虑多层掩模结构, 掩模材料也不应局限于 SiO_2 。考虑了多层掩模后, 其等效掩蔽厚度 $d(y)$ 则应为:

$$d(y) = \sum_i^n d_{\text{mask},i}(y) \times R_{p,\text{Si}}/R_{p,\text{mask},i} \quad (4)$$

式中 i 为掩蔽层的序数, $d_{\text{mask},i}(y)$ 为第 i 层掩模的厚度, 而 $R_{p,\text{mask},i}$ 为第 i 层掩模的投影射程。为适应工艺的现况, 我们取 $i=2$, 即双层掩模。第一层掩模可以是多晶硅、氮化硅、光刻胶或二氧化硅, 第二层为 SiO_2 , 这样就有:

$$d(y) = d_{\text{mask},1}(y) \cdot R_{p,\text{Si}}/R_{p,\text{mask},1} + d_{\text{SiO}_2}(y) \times R_{p,\text{Si}}/R_{p,\text{SiO}_2} \quad (5)$$

用(3)、(5)两式就可以求出衬底任意点 (x_0, y_0) 处的注入离子浓度, 从而得到注入离子浓度的二维分布。计算中注入离子在靶材料中的投影射程 R_p 、标准偏差 ΔR_p 、 $\Delta R_{p\perp}$

等参数可以根据给出的注入能量值用 Gibbons 等^[7]统计的有关数据通过查表及内插法获得。

三、数值处理

计算衬底中 (x_0, y_0) 点注入离子浓度的(3)式如果不加处理地用 Simpson 法则进行积分, 将化费大量机时, 且精度无明显提高。这是因为一维分布 $c(x_0, d(y))$ 只在掩模边界附近才有较大变化, 在远离掩模边界一般不随 y 变化。因此我们无需在远离掩模边界处作过多的重复计算。

若在某一区域 (a, b) 内 $d(y)$ 为常数, 则一维分布 $c(x_0, d(y))$ 也为常数, 不随 y 变化, 则积分:

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta R_{p\perp}}} \int_a^b c(x_0, d(y)) \cdot \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2}\right] dy \quad (6)$$

中的 $c(x_0, d(y))$ 就可提到积分号外, 成为:

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta R_{p\perp}}} \cdot c(x_0, d(a)) \int_a^b \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2}\right] dy \quad (7)$$

作变量变换后, 可得:

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta R_{p\perp}}} \cdot c(x_0, d(a)) \int_{\frac{y_0 - a}{\sqrt{2\Delta R_{p\perp}}}^2}^{\frac{y_0 - b}{\sqrt{2\Delta R_{p\perp}}}^2} \exp(-\xi^2) d\xi \quad (8)$$

右边积分后有

$$I = \frac{1}{2} \cdot c(x_0, d(a)) \left[-\operatorname{erfc}\left(\frac{y_0 - a}{\sqrt{2\Delta R_{p\perp}}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{y_0 - b}{\sqrt{2\Delta R_{p\perp}}}\right) \right] \quad (9)$$

这样 (a, b) 区域内的积分简化成同余误差函数相乘的运算。

为了利用简化计算式(9), 我们把 y 方向分成 n 个小段, 并注意在掩模边缘处分得较密, 在远离边界处分得较疏, 使每小段内可近似认为 $d(y)$ 不变 (见图 2)。则在每小段内的 $c(x_0, d(y))$ 也为常数, 于是(3)式可写为:

$$\begin{aligned} N(x_0, y_0) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta R_{p\perp}}} \left\{ \int_{-\infty}^{a_1} c(x_0, d(y)) \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2}\right] dy + \dots \right. \\ & + \int_{a_{k-1}}^{a_k} c(x_0, d(y)) \cdot \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2}\right] dy + \dots \\ & \left. + \int_{a_{n-1}}^{+\infty} c(x_0, d(y)) \exp\left[-\frac{(y_0 - y)^2}{2\Delta R_{p\perp}^2}\right] dy \right. \\ & - \sum_{k=1}^n \frac{1}{2} c(x_0, d(a_k)) \cdot \left[-\operatorname{erfc}\left(\frac{y_0 - a_{k-1}}{\sqrt{2\Delta R_{p\perp}}}\right) \right. \\ & \left. + \operatorname{erfc}\left(\frac{y_0 - a_k}{\sqrt{2\Delta R_{p\perp}}}\right) \right] \quad (10) \end{aligned}$$



图 2 掩模边缘分割示意图

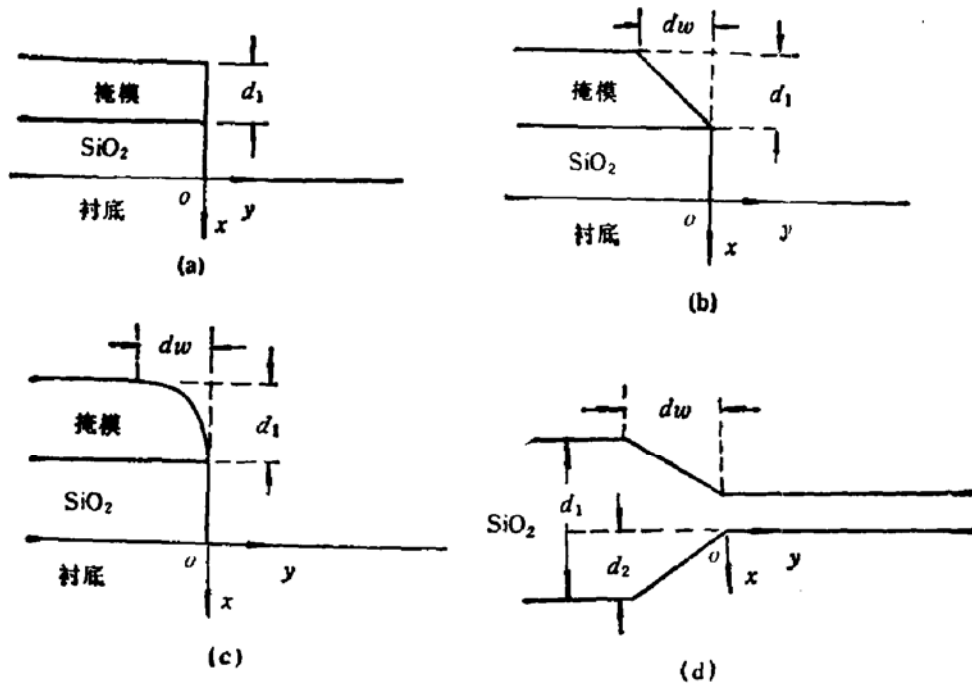


图3 四种典型掩模边缘示意图
(a) 陡直边缘 (b) 斜面边缘 (c) 椭圆边缘 (d) 鸟嘴边缘

其中 $a_0 \ll y_0$ 即 $a_0 \rightarrow -\infty$; $a_0 \gg y_0$ 即 $a_0 \rightarrow +\infty$.

由(10)式,我们可分二步计算 (x_0, y_0) 处注入离子浓度值。第一步: 用一维分布计算 n 个小区域中每个区域的纵向(x 方向)离子浓度分布区 x_0 处的值 $c(x_0, d(a_k))$ 。第二步: 将求得的 n 个浓度值对应地乘上横向因子((10)式中的第二项), 然后求和, 所得结果除以 2。

通过上述处理,从原则上说,我们已可以计算任意掩模边缘形状下的注入离子分布。但由于如图 3 所示的四种掩模边缘形状已能较好地近似各种实际的掩模边缘,所以在我们的程序中,只处理了这四种掩模边缘形状。

图 3(a) 表示陡直状边缘,图中 d_1 表示第一层掩蔽厚度,这种掩模计算时沿 y 方向只需分成 $y \geq 0$ 和 $y < 0$ 二个区域段。表示斜面状边缘的图 3(b) 中, dw 为斜面在 y 方向的投影长度,计算这种掩模边缘时,沿 y 方向我们分成 22 个区域段,其中在 dw 区域内被分成 20 个段,保证每段内掩蔽厚度近似不变。表示椭圆状边缘的图 3(c) 中, d_1 和 dw 分别为椭圆长轴与短轴,其沿 y 方向划分与斜面状边缘类似。图 3(d) 则近似表示了鸟嘴状边缘,在 y 方向也划分成 22 段,在 dw 区域包含 20 段,掩蔽材料则认为是 SiO_2 。

在实际注入离子浓度分布计算中,并不要求计算独立的随意点的浓度值,而只要计算各确定点上的浓度值,从而反映整个空间的浓度分布变化。这个确定点实际就是网格点。在我们开发的二维离子注入模型程序中分了 3200 (80×40) 个网格点。纵向与横向都分成高低分辨率,以保证在掩模边缘附近能精确反映注入离子浓度的分布变化。

在我们开发的二维离子注入模拟程序中,对于注入窗口下的离子分布我们是通过计算其一半的注入分布,然后通过对称重复来获得整个窗下的注入分布。这种方法对于现今的工艺是很适用的 (MOS 工艺中注入能量很少超过 250 keV)。当注入窗口缩小到

1 μm , 由对称方法获得的结果与完整计算获得的结果相差很小 ($<1\%$), 然而这种方法却可以节省大量存贮空间和运行时间。

四、程序结构概述

根据上述模型及数值处理所开发的二维离子注入模拟程序命名为 FUTIS (Fudan University Two Dimensional Ion Implantation Simulator)。FUTIS 源程序共有近 2200 条 FORTRAN-77 语句, 它由一个主程序、一个数据块及 22 个子程序和特殊函数组成。此程序在 CONCEPT-32/2750 计算机上运行成功, 计算一次注入分布所需时间大多在 60 秒 (CPU 时间) 内, 为了便于程序的修改和调试, 我们采用了模块结构。

FUTIS 程序的输入文件采用和 SUPREM、SEDAN 及 MINIMOS 等相类似的国际上通用的格式。其输出采用文件形式的表格打印及图形显示。FUTIS 允许在同一掩模条件下连续注入 5 次不同类型、不同能量和剂量的杂质。模拟空间的深度可任意调节, 高精度区最小网格间距可达 0.02 μm 。

根据“数值处理”部份关于浓度分布的二步计算方法, FUTIS 程序可分成三大部份。第一部份是输入准备部份, 由七个子程序完成输入参数语法检查、掩模分块等功能。第二部份为纵向一维分布计算, 由 10 个子程序完成对各分割区域内一维纵向分布计算。第三部份是横向累加与输出部份, 由 2 个子程序完成。图 4 是 FUTIS 的工作流程图。

五、模拟结果及比较

本节列出了用 FUTIS 模拟的几种结果。由于目前国内外尚无有效地直接测定二维杂质分布的实验手段。因此 FUTIS 的模拟结果只能与其它有关的模拟结果和文献进行一些比较。

虽然我们的 FUTIS 是二维模拟器, 但若将掩蔽层看成完全平整的, 则 FUTIS 将退化成一维模拟器。将此模拟结果与 SUPREM-II 计算结果比较显示在表 1 中, 从表 1 中可以看出对于磷、硼二种不同的注入杂质分布, FUTIS 与 SUPREM-II 的模拟结果符合得很好。

图 5 则是 FUTIS 计算得到的结果与 S. Selberherr^[8] 结果相比较。从图中可以看出在远离边界处, 偏差较大, 这是必然的。因为在 S. Selberherr 计算中其纵向采用一维 Pearson-IV 分布, 并未考虑指数拖尾修正, 因此下降较慢。从中也反

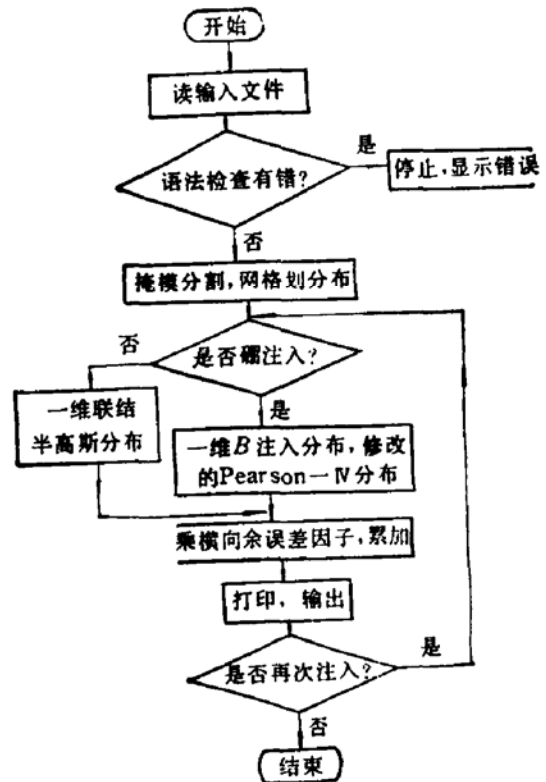


图 4 FUTIS 工作流程图

表 1 一维 FUTIS 与 SUPREM-II 模拟结果的比较

纵向深度 [μm]	0.02	0.06	0.10	0.16	0.22
FUTIS 杂质浓度 cm^{-3}	7.735 E 17	4.759 E 16	1.456 E 15	2.102 E 12	6.302 E 8
SUPREM 杂质浓度 cm^{-3}	7.735 E 17	4.759 E 16	1.456 E 15	2.102 E 12	6.302 E 8
相对偏差	0	0		0	0

(a)

纵向深度 [μm]	0.02	0.10	0.18	0.30	0.50
FUTIS 杂质浓度 cm^{-3}	4.159 E 18	1.448 E 19	4.196 E 19	2.639 E 19	4.234 E 17
SUPREM 杂质浓度 cm^{-3}	4.154 E 18	1.447 E 19	4.191 E 19	2.636 E 19	4.229 E 17
相对偏差	0.11%	0.07%	0.10%	0.11%	0.10%

(b)

* 注入能量 100 keV, 剂量 $1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (a) 注入磷, 衬底覆有 $0.2 \mu\text{m}$ SiO_2 层; (b) 注入硼, 衬底覆有 $0.1 \mu\text{m}$ SiO_2 层.

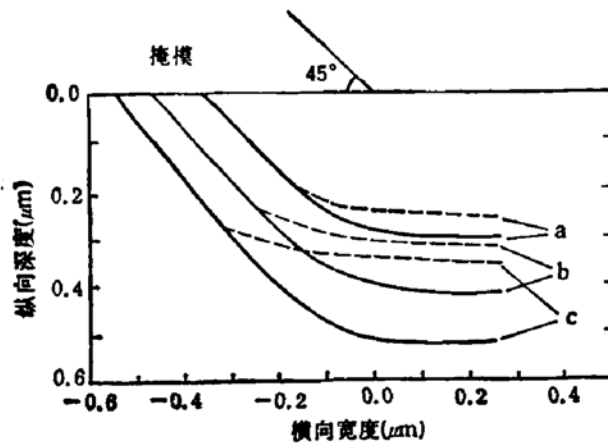


图 5 FUTIS 与 [8] 比较 —— FUTIS ----- 文献 [8]
 曲线 (a)、(b)、(c) 分别代表浓度 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
 硼注入, 60 keV, 剂量: 10^{16} cm^{-2}

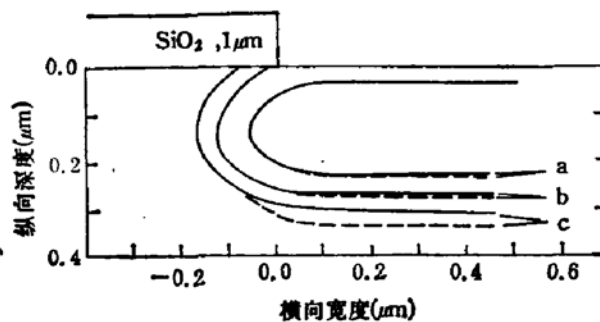
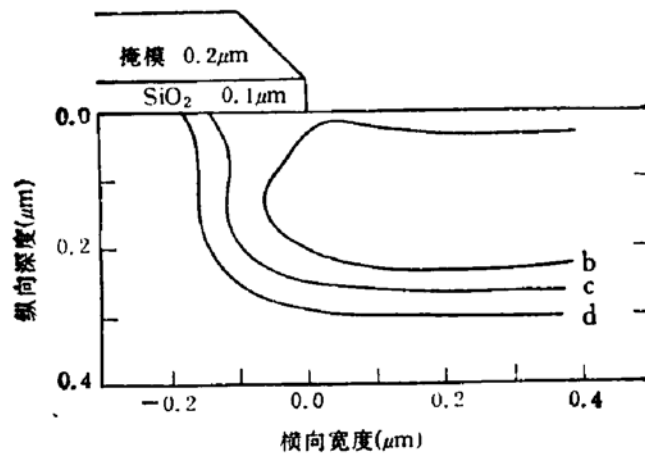


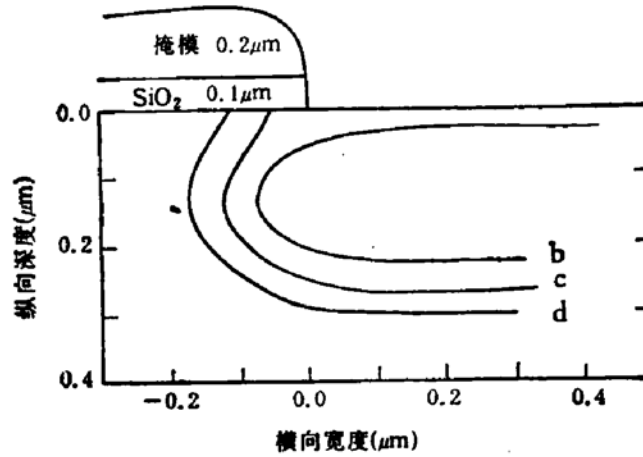
图 6 FUTIS 与 COMPOSITE 结果比较
 —— FUTIS, ----- COMPOSITE 曲线 a, b, c 分别表示浓度
 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
 磷注入, 100 keV 剂量: $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

映了 FUTIS 所用模型比它有更精确考虑.

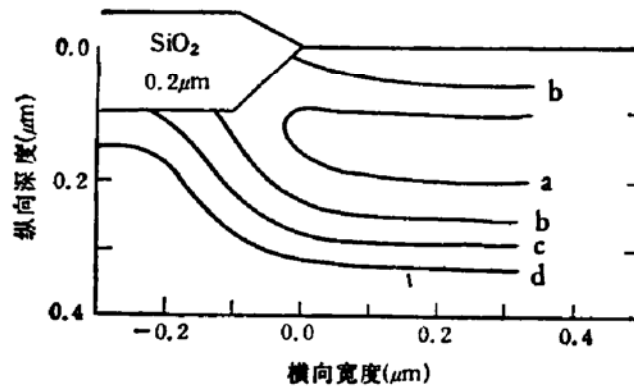
图 6 是 FUTIS 与 COMPOSITE 模拟结果的比较, 两者在远离边缘处的偏离同样也



(a) 斜面状边缘注入分布



(b) 椭圆状边缘注入分布



(c) 鸟嘴边缘注入分布

图7 三种不同掩蔽边缘下的注入分布
 磷注入, 100 keV, 剂量: $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$
 曲线上 a, b, c, d 分别代表浓度 1×10^{19} ; 1×10^{18} ; 1×10^{17} ; $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
 (a) 斜面状边缘注入分布 (b) 椭圆边缘注入分布 (c) 鸟嘴边缘注入分布

是由于在纵向分布所用的模型不同造成的, 对磷注入 COMPOSITE 采用简单高斯分布, 而 FUTIS 则采用精确的联结半高斯分布。

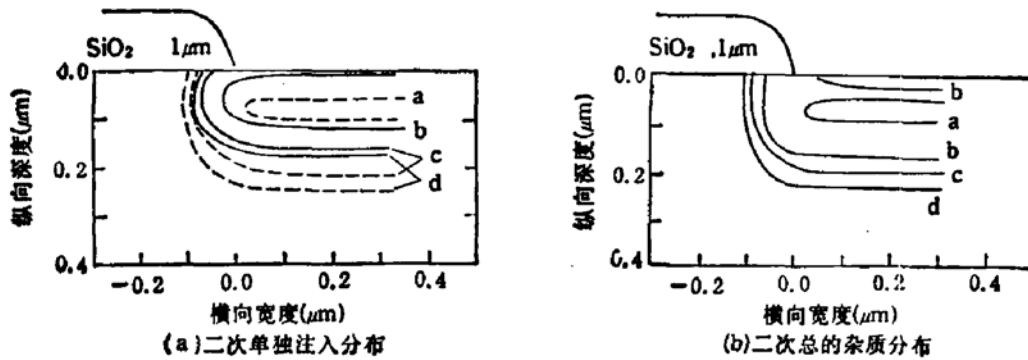


图 8 多次注入的分布计算

(a) 二次单独注入的分布——P 注入, 40keV, 10^{12}cm^{-2} --- As 注入, 100 keV, 10^{14}cm^{-2} 曲线上 a, b, c, d 分别表示浓度 1×10^{21} ; 1×10^{16} ; 1×10^{14} ; $1 \times 10^{13}\text{cm}^{-3}$

(b) 二次总的杂质分布

曲线上 a, b, c, d 分别表示浓度 1×10^{21} ; 1×10^{16} ; 1×10^{14} ; $1 \times 10^{13}\text{cm}^{-3}$

图 7(a)、(b)、(c)是我们利用 FUTIS 计算的在不同掩蔽边缘下的注入杂质分布。从中可见,对于不同的掩蔽边缘,注入离子分布有很大不同。

图 8(a)(b)则显示了在连续二次注入下的分布。一次是高能砷注入,另一次是低能磷注入。图 8(a)显示的是二次单独注入的分布,而图 8(b)则显示了总的注入离子分布。

六、结 论

从前面的分析比较可以看出 FUTIS 所用模型比已有的二维模拟器有较大改进,对于掩模边缘形状的处理比较细致,并且考虑了多层掩蔽及多次注入。因此无论在模拟精度及功能上都有较大提高。由于程序中主要采用查表、插值和解析计算,所以有较快速度,不存在数值截断误差。利用这一模拟器,对小尺寸器件的制作具有一定的指导意义。

参 考 文 献

- [1] D. A. Antoniadis and R. W. Dutton, *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, **SC-14**, 412—422 (1979).
- [2] C. P. Ho et al., *IEEE Trans. on Electron Devices*, **ED-30**, 1438—1453 (1983).
- [3] D. Chin et al., *IEEE Trans. on Electron Devices*, **ED-29**, 336—340 (1982).
- [4] B. R. Penumalli, *IEEE Trans. on Electron Devices*, **ED-30**, 986—992 (1983).
- [5] J. Lorenz et al., *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*, **CAD-4**, 421—430 (1985).
- [6] H. Runge, *Phys. Status Solidi*, **39(a)**, 595—599 (1977).
- [7] J. F. Gibbons et al., *Projected Range Statistics Semiconductor and Related Materials*, 2nd, Halstead Press (1975).
- [8] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, P. 62, Springer-Verlag Wien New York (1984).

Improved Model and Numerical Simulation for Two Dimensional Ion Implantation

Xu Chenxi, Ruan Gang and Wang Jianwei
(*Microelectronics Institute, Fudan University, Shanghai*)

Abstract

A new two dimensional ion implantation model is presented. The two dimensional distribution of the implanted impurity near an arbitrary shaped mask edge is described by a two half-Gaussian profile or a modified Pearson-IV distribution in the vertical direction and by a complementary error function in the lateral direction. The different stopping powers of the various mask materials for multi-layer mask have been considered. Using this model, an implantation process simulator has been developed which can continuously calculate the impurity profile for several times with different energy, dose and impurity. In the calculated results, the effects of the various mask edges have also been taken into account. It is shown that our simulators both in accuracy and function are much better than the other ones.

KEY WORDS: Ion implantation, IC process, Process model, Two dimensional, Simulation