01;06 Аналитическая модель диффузионного перераспределения ионно-имплантированной примеси в подзатворной области МОП-транзистора

© Е.Н. Бормонтов, Ю.И. Брязгунов, В.П. Леженин

Воронежский государственный университет E-mail: phme22-1@main.vsu.ru

Поступило в Редакцию 29 июля 2002 г.

Решена задача о диффузионном перераспределении имплантированной примеси в системе двуокись кремния — кремний в процессе термического отжига с учетом различия параметров двух сред и сегрегации примеси на границе их раздела.

Широкое использование ионной имплантации в технологии микроэлектроники определяет необходимость разработки моделей МОП (металл-окисел-полупроводник) элементов интегральных схем (ИС) с учетом неоднородного распределения имплантированной примеси, оказывающего существенное влияние на электрические параметры МОПструктуры. Аналитические модели, подобные [1], позволяют получить явные выражения для рабочих характеристик МОП-прибора, однако точность их невысока из-за использования грубых аппроксимаций реального профиля легирующей примеси (в виде ступенчатой или импульсной функций). С другой стороны, численные модели с более реальными профилями примеси зависят от большого числа плохо определяемых параметров и малопригодны для выбора технологических режимов формирования ионно-легированных МОП-элементов ИС. Сохранить "технологическую прозрачность" входящих в модель параметров и сократить затраты машинного времени позволяет полуаналитическое моделирование ионно-легированных МОП-транзисторов [2–4], в котором обычно используется гауссовская аппроксимация, хорошо описывающая распределение примеси непосредственно после имплантации [5]. Использование этой аппроксимации в полуаналитических

14

моделях требует физического обоснования, так как последующие термообработки для разгонки и активации примеси приводят к диффузионному перераспределению имплантированной примеси. В работе дан анализ такого перераспределения в системе SiO₂–Si с учетом различия параметров двух сред и сегрегации примеси на границе их раздела, позволяющий установить условия, в которых результирующий профиль примеси можно аппроксимировать суперпозицией модифицированных распределений Гаусса.

При изготовлении МОП-транзисторов обычно применяется ионное легирование бором, фосфором и мышьяком. Для устранения эффекта каналирования и регулирования глубины залегания ионов имплантацию примеси, как правило, проводят через тонкий аморфный слой окисла, функцию которого обычно выполняет подзатворный диэлектрик. Система SiO₂–Si является двухслойной мишенью, имеющей близкие атомные номера и массы, поэтому для нее можно воспользоваться простой моделью Ишивары [6], согласно которой распределение ионно-легированной примеси $N_0(x)$ непосредственно после имплантации имеет вид функции Гаусса

$$N_0(x) = N_B + \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\,\Delta R_{\rm PSi}} \exp\left[-\frac{(x_C - x)^2}{2\Delta R_{\rm PSi}^2}\right],\tag{1}$$

где N_B — базовая концентрация примеси в полупроводниковой подложке, D_I — доза имплантированных ионов, $\Delta R_{\rm PSi}$ — среднеквадратичное отклонение ионов в кремнии, $x_C = (R_{\rm PSiO_2} - d_{\rm SiO_2})\Delta R_{\rm PSi}/\Delta R_{\rm PSiO_2}$ центроид имплантированной примеси, $R_{\rm PSiO_2}$ — средняя длина пробега ионов в окисле, $d_{\rm SiO_2}$ — толщина подзатворного окисла, $\Delta R_{\rm PSiO_2}$ среднеквадратичное отклонение ионов в окисле.

Для нахождения результирующего профиля распределения имплантированной примеси с учетом диффузионных и сегрегационных явлений вблизи границы раздела окисел–кремний необходимо решить уравнение диффузии (Фика)

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \, \frac{\partial^2 N}{\partial x^2},\tag{2}$$

где N — концентрация примеси, D — коэффициент диффузии.

Так как имплантация в подзатворную область МОП-приборов проводится через слой окисла с толщиной порядка R_{PSiO_2} , максимум распределения имплантированной примеси x_C лежит вблизи границы

раздела окисел-полупроводник и для точного нахождения результирующего профиля необходимо решение уравнения (2) в двух областях — в полупроводнике и окисле. Однако ширина запрещенной зоны SiO₂ составляет около 8 eV, поэтому используемые для имплантации легирующие примеси (бор, фосфор, мышьяк, сурьма) при температуре эксплуатации МОП-приборов ($\sim 300 \text{ K}$) неактивны, их заряд равен нулю и не входит в уравнение Пуассона. Следовательно, для моделирования МОП-приборов достаточно знать распределение примеси только в полупроводнике.

В случае низкотемпературного кратковременного отжига, применяемого на конечных стадиях изготовления МОП ИС для активации малых доз имплантированной примеси при корректировке порогового напряжения МОП-транзистора обогащенного типа, профиль распределения изменяется незначительно. В этом случае диффузионная длина примеси $L = \sqrt{D_{\text{Si}t}} \ll \Delta R_{\text{PSi}} (D_{\text{Si}} -$ коэффициент диффузии примеси в кремнии, t — время отжига), поэтому при учете диффузионного перераспределения среду можно считать однородной и бесконечной. Решение уравнения Фика (2) с начальным условием в виде гауссовского распределения (1) представляет собой также гауссовскую функцию с модифицированным стандартным отклонением $\sigma = \sqrt{\Delta R_{\text{PSi}}^2 + 2Dt}$ [4]:

$$N(x,t) = N_B + \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x_C - x)^2}{2\sigma^2}\right].$$
 (3)

С другой стороны, при формировании встроенного канала транзистора обедненного типа применяется длительная высокотемпературная разгонка имплантированной примеси. При этом ее диффузионная длина L может превосходить ΔR_{PSi} , и при нахождении результирующего профиля необходимо учитывать неоднородность среды.

Так как толщина подзатворного диэлектрика составляет 20–50 nm и значительно превышает характерные для современной технологии диффузионные длины используемых имплантантов в окисле $L = \sqrt{D_{SiO_2}t} < 10$ nm (D_{SiO_2} — коэффициент диффузии примеси в двуокиси кремния), то при решении уравнения Фика область диэлектрика можно считать полубесконечной, так же как и область полупроводника с толщиной порядка сотен микрометров. Таким образом, уравнение Фика с соответствующими граничными условиями для данной структуры

имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial N_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2}, & x \leq 0; \\ \frac{\partial N_S}{\partial t} = D_S \frac{\partial^2 N_S}{\partial x^2}, & x \geq 0. \end{cases}$$
(4)

$$\begin{cases} D_i \frac{\partial N_i}{\partial x} = D_S \frac{\partial N_S}{\partial x}, & x = 0, t > 0; \\ \mu N_i = N_S, & x = 0, t > 0; \\ N_i = 0, & x \to -\infty, t \ge 0; \\ N_S = 0, & x \to +\infty, t \ge 0. \end{cases}$$
(5)

В формулах (4) и (5) индекс *i* относится к окислу, индекс *s* — к полупроводнику, *µ* — коэффициент сегрегации примеси на границе раздела окисел-полупроводник.

Начальным условием к системе (4), (5) выбирается распределение примеси по модели Иппивары, имеющее гауссову форму (1). Как уже отмечалось, толщина подзатворного окисла в современных приборах не превышает 50 nm. Характерные энергии имплантируемых ионов бора — 40–60 keV, фосфора — порядка 100 keV. При таких энергиях максимум распределения примеси x_C лежит на глубине более 1.5 ΔR_{PSi} , поэтому практически вся имплантированная примесь (более 95%) попадает в кремний. Так как в окисле содержится менее 5% имплантированной примеси, ее начальным распределением в этой области можно пренебречь и для нахождения результирующего профиля ограничиться решением задачи (4), (5), (1) только в области полупроводника.

Система (4), (5) представляет собой краевую задачу третьего рода для уравнения параболического типа. Решение данной задачи представляется в виде суммы решений только начальной задачи $N_1(x, t)$ и только граничной задачи $N_2(x, t)$:

$$N(x,t) = N_1(x,t) + \gamma N_2(x,t),$$
(6)

где $\gamma = (\mu - \sqrt{D_{\rm SiO_2}/D_{\rm Si}})/(\mu + \sqrt{D_{\rm SiO_2}/D_{\rm Si}})$ — коэффициент "влияния границы раздела".

Задача решается методом функции источника [7]:

$$N_1(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty N_0(\xi) \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}\right] d\xi,$$
 (7)

$$N_2(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty N_0(\xi) \exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4Dt}\right] d\xi.$$
 (8)

Подставляя в (7), (8) начальное распределение $N_0(\xi)$ в виде (1), получим

$$N(x,t) = \frac{N_B}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] + \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x_C - x)^2}{2\sigma^2}\right] \\ \times \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{\frac{x_C}{\Delta R_{PSi}^2} + \frac{x}{2Dt}}{2\sqrt{\frac{1}{2\Delta R_{PSi}^2} + \frac{1}{4Dt}}}\right) \right\} \\ + \gamma \left[\frac{N_B}{2} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] + \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x_C + x)^2}{2\sigma^2}\right] \\ \times \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{\frac{x_C}{\Delta R_{PSi}^2} - \frac{x}{2Dt}}{2\sqrt{\frac{1}{2\Delta R_{PSi}^2} + \frac{1}{4Dt}}}\right) \right\} \right].$$
(9)

В выражении (9) $\sigma = \sqrt{\Delta R_{\rm PSi}^2 + 2Dt}$ — "модифицированное" стандартное отклонение.

Проанализируем полученное соотношение. Решение представляет собой сумму двух функций $N_1(x,t)$ и $N_2(x,t)$, симметричных относительно границы раздела окисел-кремний, причем второе слагаемое входит в (9) с коэффиицентом γ , лежащим в диапазоне [-1;1]. Поскольку максимум распределения расположен в области полупроводника ($x_c > 0$), то $N_1(x,t) > N_2(x,t)$ при всех x > 0, а при x = 0 $N_1(x,t) = N_2(x,t)$ (рис. 1). Обозначим множители в фигурных скобках в выражении (9) через $f_1(x,t)$ и $t_2(x,t)$, а входящие в (9) функции Гаусса через $N_1^*(x)$ и $N_2^*(x)$ соответственно. Функции $N_1^*(x)$ и $N_2^*(x)$, $f_1(x,t)$ и $f_2(x,t)$ также попарно симметричны относительно границы раздела окисел-кремний.



Рис. 1. Графики функций N(x), $N_1(x)$, $N_2(x)$ и $\gamma N_2(x)$ с типичными для бора параметрами имплантации и термообработки: $x_C = 0.1 \,\mu$ m, $\Delta R_P = 0.05 \,\mu$ m, $L = 0.065 \,\mu$ m, $\gamma = 0.1$.

Функции $f_1(x, t)$ и $f_2(x, t)$ зависят от начальных параметров распределения xC и ΔR_{PSi} и диффузионной длины примеси в кремнии $L = \sqrt{D_{Si}t}$. При формировании встроенных каналов обычно проводится двухстадийная разгонка имплантированной примеси со следующими типичными параметрами: для бора (*p*-канал) температура первого отжига $T_1 = 950^{\circ}$ С, время $t_1 = 70$ min; температура второго отжига $T_2 = 1000^{\circ}$ С, время $t_2 = 20$ min; для фосфора (*n*-канал) $T_1 = 950^{\circ}$ С, $t_1 = 100$ min; $T_2 = 1000^{\circ}$ С, $t_2 = 30$ min. При этом диффузионная длина как бора, так и фосфора $L = \sqrt{D_1t_1 + D_2t_2} \approx 0.065 \,\mu$ m. Типичные значения x_C и ΔR_{PSi} составляют соответственно 0.1 и 0.05 μ m как для бора, так и для фосфора. Функция $f_1(x)$ асимптотически стремится к 1 с ростом x и превышает 0.93 при всех x > 0, поэтому с погрешностью не более 7% ее можно принять равной единице. Функция $N_2(x)$ представляет собой произведение функции $f_2(x)$ на быстро

убывающую с ростом x функцию Гаусса $N_2^*(x)$ (рис. 1), поэтому вклад функции $N_2(x)$ в общую концентрацию N(x) быстро уменьшается в глубь полупроводника и, следовательно, без большой потери точности функцию $f_2(x)$ также можно принять равной единице. Изменение базовой концентрации примеси N_B вследствие сегрегации значительно только в приграничной области на глубине до диффузионной длины L, однако этим можно пренебречь, так как концентрация имплантированной примеси в этой области на порядок превосходит N_B . Таким образом, результирующее распределение легирующей примеси в кремнии после термообработки можно представить в виде

$$N(x,t) = N_B + \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x_C - x)^2}{2\sigma^2}\right] + \gamma \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x_C + x)^2}{2\sigma^2}\right].$$
(10)

Выражение (10) уже является дважды интегрируемой функцией, однако его можно упростить, приняв во внимание значение γ при реальных температурах термообработок. Из выражения $\gamma = (\mu - \sqrt{D_{\text{SiO}2}/D_{\text{Si}}})/(\mu + \sqrt{D_{\text{SiO}2}/D_{\text{Si}}})$ видно, что γ лежит в интервале от -1 до 1, что соответствует полностью открытой и полностью закрытой границам [5]. Принято считать [8], что для бора граница раздела Si–SiO₂ является открытой ($\gamma = -1$), для фосфора — закрытой ($\gamma = 1$). Однако поскольку коэффициенты диффузии и сегрегации зависят от температуры, коэффициент γ также является температурно-зависимой величиной [9]. График температурной зависимости коэффициента влияния границы раздела для бора приведен на рис. 2. Из него видно, что при температурах больше 950°C $\gamma \leq 0.1$. Таким образом, учитывая, что $\gamma \leq 0.1$, можно записать окончательное выражение для распределения бора в кремнии после длительной высокотемпературной разгонки, которое выполняется с погрешностью, не превышающей 10% [10]:

$$N(x,t) = N_B + \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x_C - x)^2}{2\sigma^2}\right].$$
 (11)

Выражение (11) по виду не отличается от (3), однако стандартное отклонение σ в случае длительной высокотемпературной разгонки в основном определяется не ΔR_{PSi} , а параметрами термообработки (температурами и временами отжигов, определяющими диффузионную длину бора в кремнии).



Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента "влияния границы" γ для бора и фосфора.

В отличие от бора, коэффициент сегрегации фосфора на границе раздела Si–SiO₂ – $\mu \gg \sqrt{D_{SiO_2}/D_{Si}}$ при любых температурах [8], следовательно, коэффициент "влияния границы" практически не зависит от температуры и равен единице, поэтому выражение (11) нельзя использовать для описания профиля распределения фосфора вблизи границы окисел–кремний, а следует использовать выражение (10).

Таким образом, в большинстве практически важных случаев профиль имплантированной примеси имеет вид дважды интегрируемой функции, что удобно для моделирования МОП-приборов. Подчеркнем, что выбор гауссовского распределения для аппроксимации профиля легирующей примеси в данной модели не случаен. Несмотря на то, что реальные имплантационные профили несколько асимметричны и более

адекватно описываются функциями с моментами выше второго порядка (например, функцией Пирсона-IV), их использование в полуаналитическом моделировании затрудняется невозможностью интегрирования уравнения Пуассона в аналитических и специальных функциях. В то же время точности описания профиля функцией Гаусса вполне достаточно для моделирования электрических параметров МОП-приборов, что подтверждается экспериментальными данными [3,4].

Список литературы

- [1] *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов. Т. 2 / Пер. с англ. М.: Мир, 1984. 456 с.
- [2] Крупкина Т.Ю. // Изв. вузов. Радиоэлектроника. 1985. Т. 28. № 12. С. 31–34.
 [3] Бормонтов Е.Н., Леженин В.П. // Микроэлектроника. 1995. Т. 24. № 5. С. 343–348.
- [4] Бормонтов Е.Н., Леженин В.П., Сай И.В. // Микроэлектроника. 1997. Т. 26. № 1. С. 38–41.
- [5] Риссел Х., Руге И. Ионная имплантация / Пер. с нем. М.: Наука, 1983. 425 с.
- [6] *Ishivara H.* et al. Ion implantation in semiconductors. N.Y.: Plenum Press, 1975. 345 p.
- [7] Тихонов Н.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Физматгиз, 1951. 680 с.
- [8] Бубенников А.Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. М.: Высш. школа, 1989. 320 с.
- [9] Bormontov E.N., Lezhenin V.P. // 1997 MRS Spring Meeting. San Francisco. Symposium E. Abstract #10425.
- [10] Bormontov E.N., Lezhenin V.P., Lukashkov V.V. // Proc. of the 5th Int. Conf. on Simulation of Devices and Technologies. Obninsk, 1996. P. 103.