

BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 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学研究所, 西安 710071)

赵元富

(骊山微电子学研究所, 临潼 710600)

(1997 年 8 月 6 日收到; 1997 年 9 月 29 日收到修改稿)

在深入分析 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中迁移特性的基础上, 建立了 F 在多晶硅栅中的迁移方程. 采用有限差分法, 模拟了 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中的分布. 模拟结果与二次离子质谱 (SIMS) 分析结果相符. 给出了 80 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ BF_2^+ 注入多晶硅栅 900 °C, 30 min 退火条件下 F 在多晶硅中的发射系数 $e = 6 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, F 在多晶硅晶粒间界的扩散系数 $D_0 = 7.64 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$, F 在多晶 Si/SiO₂ 界面的吸收系数 $S_1 = 1.74 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, 以及 F 在多晶硅中的损伤吸收系数 $S_1^* = 7.32 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

PACC: 6170T; 6170A; 6170W

1 引 言

在多晶硅栅中引入适量的 F, 不但可以增强金属-氧化物半导体 (MOS) 器件抗热电子的能力^[1,2], 而且可以加固栅介质, 提高 MOS 器件抗 γ 辐射能力^[3,4], 因此深入分析和正确模拟 F 在多晶硅栅中的迁移特性就显得特别重要. F 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中迁移特性的分析与模拟工作已有报道^[5,6], 而 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中的迁移特性要复杂得多, 有关这方面的分析与模拟工作至今尚未见报道. 本文在深入分析 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中迁移特性的基础上, 建立了 F 在多晶硅栅中的迁移方程. 采用有限差分法, 模拟了 F 在多晶硅栅中的分布. 模拟结果与二次离子质谱 (SIMS) 分析结果符合得很好.

2 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 迁移特性的分析

BF_2^+ 注入多晶硅栅热退火前后 F 在多晶硅栅中的典型 SIMS 分布如图 1 所示. BF_2^+ 注入能量为 80 keV, 注入剂量为 $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. 热退火条件分别为 800, 900 和 1000 °C, 退

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

火时间均为 30 min. 可以看到, 退火前, F 在多晶硅栅中呈高斯分布, 注入峰的平均投影射程 R_p 大约为 70 nm. 经高温退火后, F 在多晶硅栅中的分布具有两个明显的特征^[7]: 1) F 在多晶硅中呈现双峰分布: 一个是 F 的注入峰, 一个是 F 的损伤缺陷吸收峰, 这两个 F 峰

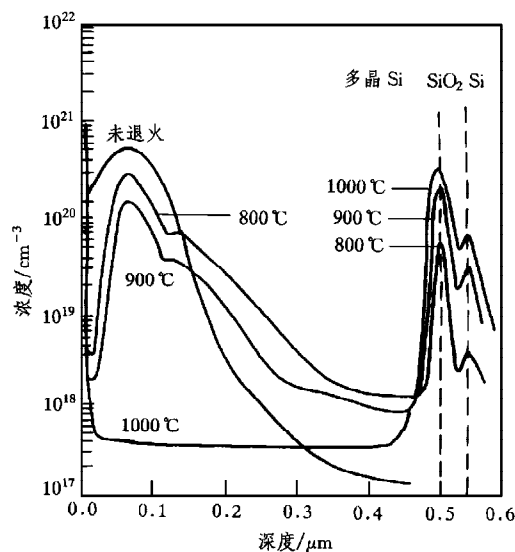


图 1 80 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ BF_2^+ 注入多晶硅栅 800, 900 和 1000 °C 退火 30 min F 的 SIMS 分布剖面

随退火温度的升高而降低, 分布宽度随退火温度的升高而变窄; 2) F 在 SiO_2 内也呈双峰分布, 即多晶-Si/ SiO_2 和 SiO_2 /Si 界面各形成一个 F 峰, 前一个 F 峰高于后一个 F 峰, 这两个 F 峰均随退火温度的升高而增加.

在分析上述 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中迁移特性时, 有三点需要着重考虑: 1) BF_2^+ 的注入特性; 2) 多晶硅栅的结构特点; 3) F 本身的特殊性质.

BF_2^+ 是一种分子离子, 质量数为 49, 比质量数为 19 的 F^+ 重得多. 当它注入多晶硅形成非晶层时所需的临界注入剂量要比 F^+ 低得多, 大约为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ^[8]. 注入剂量为 $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 的 BF_2^+ , 足以使多晶硅表层形成非晶层. 在高温退火期间, 非晶层经再结晶转变为多晶, 并在注

入层与多晶界面处(大约距表面 $2R_p$)残留下不同程度的缺陷损伤, 该残留损伤缺陷具有俘获和富集 F 原子的作用^[9]. 因此, 注入剂量为 $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 的 BF_2^+ 注入多晶硅, 除 F 的注入峰外, 还在距表面约为 $2R_p$ 处形成了另一个 F 峰——F 的损伤缺陷吸收峰.

多晶硅栅通常指多晶 Si/ SiO_2 /Si 结构. 它除多晶 Si 和 SiO_2 外, 还应包括多晶-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构成. 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. 多晶 Si/ SiO_2 界面是由多晶硅淀积在 SiO_2 上形成的, 由于多晶 Si 与 SiO_2 在结构上不匹配, 因此在界面存在着大量的缺陷. SiO_2 /Si 界面是由 Si 热氧化生长 SiO_2 形成的, 在界面包含有大量的结构缺陷和悬挂键.

F 是一种电负性很强的元素. 它有两个独特的特点: 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, 因此注入损伤、界面缺陷在高温退火时将吸收 F 原子而形成 F 峰, 一般称之为 F 的吸收.

因此, 在分析 BF_2^+ 注入多晶硅栅 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 中的扩散外, 还应考虑: 1) F 在晶粒与晶粒间界之间的发射与吸收; 2) 注入损伤缺陷区对 F 的吸收与发射(即注入损伤缺陷对 F 的释放); 3) 多晶 Si/ SiO_2 和

SiO_2/Si 两个界面对 F 的吸收.

3 F 在多晶硅栅中迁移的物理模型与迁移方程

为了定量模拟 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与迁移方程.

3.1 物理模型

多晶硅栅几何结构的一维模型如图 2 所示. 假定多晶硅晶粒为长方体, 它的厚度即为多晶硅的膜厚, 用 d 表示, 它的宽度即为晶粒的大小, 用 L_g 表示, 晶粒间界用 L_b 表示.

1. 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_g , D_g 表示.

2. F 沿晶粒间界的扩散 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.

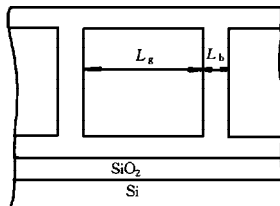


图 2 多晶硅栅几何结构的一维模型

3. F 在晶粒与晶粒间界之间的发射与吸收 由于 F 在晶粒内的固溶度极低, 因此在退火过程中, 注入的 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 F 的总量是有限度的, 因此发射能否成功, 还要受晶粒间界所能容纳的 F 的最大浓度的限制. 若 $C_{b \max}$ 表示晶粒间界所能容纳的 F 的最大浓度, 则 $\frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}}$ 表示发射能否成功的概率. F 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的 F, 其吸收系数用 a 表示. 由于晶粒间界与晶粒的宽度不一样, 因此一定量的 F 从晶粒发射到晶粒间界中时, 在浓度上会有 L_g/L_b 倍的增加; 同样, 一定量的 F 从晶粒间界被吸收到晶粒中时, 在浓度上会有 L_b/L_g 倍的减少. 晶粒对 F 的吸收远小于对 F 的发射, 一般情况下可以忽略.

4. 注入损伤区对 F 的吸收与发射 由于 BF_2^+ 的注入剂量大于形成非晶层所需的临界注入剂量, 因此除 F 的注入峰外, 还在距表面约 $2R_p$ 处形成了 F 的损伤缺陷吸收峰. 它对 F 的吸收系数用 S_1^* 表示. 随着退火温度的升高, 损伤逐渐恢复, 吸收的 F 随之被释放, 这个过程也可被看作损伤缺陷吸收峰对 F 的发射作用. 被发射的 F 将通过晶粒间界扩散到多晶 Si/SiO₂ 界面被该界面所吸收, 其吸收系数用 S_2^* 表示.

5. F 在多晶 Si/SiO₂ 界面的吸收 由于多晶 Si/SiO₂ 界面有大量结构缺陷, 它将吸收 F 而形成界面 F 峰, 其吸收系数用 S_1 来描述. F 在该界面的浓度则用 C_{S_1} 表示.

6. F 在 SiO₂ 中的扩散 多晶 Si/SiO₂ 界面吸收的 F, 在高温下通过 SiO₂ 向 SiO₂/Si 界面扩散, 其扩散系数用 D_{SiO_2} 表示.

7. F 在 SiO₂/Si 界面的吸收 通过 SiO₂ 扩散到 SiO₂/Si 界面的 F 被该界面吸收形成

另一个 F 峰,其吸收系数用 S_2 描述. F 在 SiO_2/Si 界面的浓度则用 C_{S_2} 表示.

8. 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 迁移方程

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.

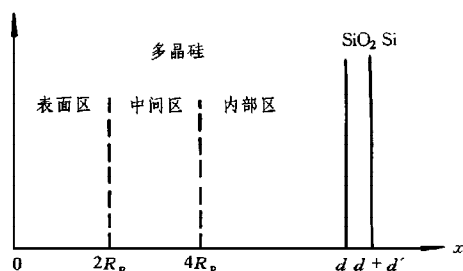


图 3 多晶硅部分三个区的划分

1. 多晶硅部分 在一维扩散方程的基础上,还应考虑晶粒与晶粒间界之间的发射和吸收、多晶 Si/SiO_2 界面对 F 的吸收、以及晶粒与晶粒间界的宽度比的影响和晶粒间界最大固溶度的限制.由于还存在损伤区对 F 的吸收和发射,因此 F 在多晶硅和多晶 Si/SiO_2 界面的迁移方程分三个区(如图 3 所示)给出.

表面区:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 C_g}{\partial X^2} - eC_g \frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}} + aC_b \frac{L_b}{L_g}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b}{\partial X^2} + eC_g \frac{L_g}{L_b} \frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}} - aC_b - S_1 C_b - S_1^* C_b, \quad (2)$$

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

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

式中 W 为多晶 Si/SiO_2 界面的吸收长度, C_T 为 F 在多晶硅中的表观浓度.

中间区:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 C_g}{\partial X^2} - eC_g \frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}} + aC_b \frac{L_b}{L_g}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b}{\partial X^2} + eC_g \frac{L_g}{L_b} \frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}} - aC_b - S_2^* C_b + \int_0^{2R_p} S_1^* C_b dx, \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_{S_1}}{\partial t} = \int_{2R_p}^{4R_p} S_2^* C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} dx, \quad (7)$$

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

内部区:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 C_g}{\partial X^2} - eC_g \frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}} + aC_b \frac{L_b}{L_g}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b}{\partial X^2} + eC_g \frac{L_g}{L_b} \frac{C_{b \max} - C_b}{C_{b \max}} - aC_b - S_1 C_b, \quad (10)$$

$$\frac{\partial C_{S_1}}{\partial t} = \int_{4R_p}^d S_1 C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} dx, \quad (11)$$

$$C_T = C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} + C_g \frac{L_g}{L_b + L_g}. \quad (12)$$

2. SiO_2 部分 在一维扩散方程的基础上, 还应考虑 SiO_2/Si 界面的吸收, 于是 F 在 SiO_2 和 SiO_2/Si 界面的迁移方程如下:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = D_{\text{SiO}_2} \frac{\partial^2 C_T}{\partial X^2} - S_2 C_T, \quad (13)$$

$$\frac{\partial C_{S_2}}{\partial t} = \int_d^{d+d'} S_2 C_T dx + e C_T, \quad (14)$$

式中 d' 为 SiO_2 膜的厚度.

3. Si 部分 F 在 Si 中的迁移方程如下:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 C_T}{\partial X^2} - e C_T. \quad (15)$$

方程(1)~(15)是一组 F 在多晶硅栅中的迁移方程, 其初始条件和边界条件如下.

初始条件:

F 在多晶硅中的初始分布为高斯分布,

$$C(X) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(X - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad (16)$$

式中 D 是 F 的注入剂量, 为 BF_2^+ 注入剂量的二倍; 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. F 的注入能量可由 BF_2^+ 注入能量按质量分配原则确定.

边界条件:

$$X = 0, \quad \frac{\partial C_{S_1}}{\partial t} = \int_0^{R_p} S_1 C_b \frac{L_b}{L_b + L_g} dx, \quad (17)$$

$$X > d + d', \quad C_T \rightarrow 0. \quad (18)$$

4 模拟与结果分析

忽略 F 在晶粒内的慢扩散和晶粒对 F 的吸收, 即 $D_g = 0$, $a = 0$, 则方程(1), (2), (5), (6)和(9), (10)可以简化. 采用龙格-库塔方法将其离散. 选择时间步长 Δt 为 $(1/8)s$, 距离步长 ΔX 为 10 nm . 通过求解上述微分方程组, 就可模拟出退火后 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中的分布. 方程中含有的一些描述 F 在多晶硅栅中迁移特性的系数, 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 80 keV , $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ BF_2^+ 注入多晶硅栅 900°C , 30 min 退火 F 在多晶硅栅中分布的模拟结果. 可以看到, 模拟结果不仅定性描述了 F 在多晶硅中的双峰分布和在 SiO_2 两个界面的双峰分布等特点, 而且在定量上也与 SIMS 剖面分布一致. 这表明, 在本

文中提出的 BF_2^+ 注入多晶硅栅 F 在多晶硅栅中迁移的物理模型和迁移方程是正确的。

在上述模拟中,通过与 SIMS 实验数据相拟合,还得到了 80 keV , $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ BF}_2^+$ 注入多晶硅栅 900°C , 30 min 退火条件下,描述 F 在多晶硅栅中迁移特性的几个主要实验

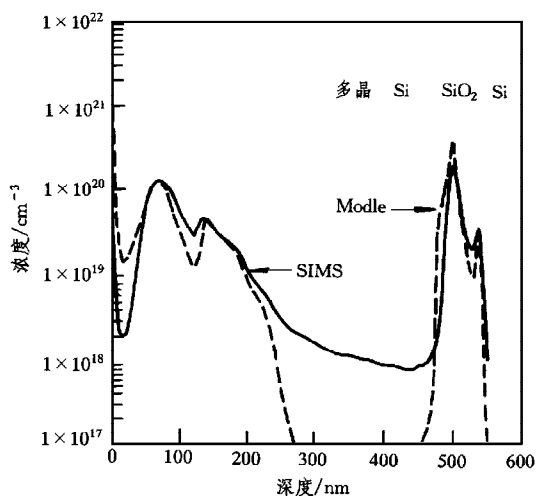


图4 80 keV , $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ BF}_2^+$ 注入多晶硅栅 900°C , 30 min 退火的模拟结果与 SIMS 分布剖面

常量: 1) F 在多晶硅中的发射系数 $e = 6 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$; 2) F 在多晶硅晶粒间界的扩散系数 $D_b = 7.64 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$; 3) F 在多晶 Si/SiO₂ 界面的吸收系数 $S_1 = 1.74 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$; 4) F 在多晶硅中的损伤吸收系数 $S_1^* = 7.32 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

- [1] Y. Nishioka, K. Ohya, Y. Ohji, N. Natsuaki, K. Mukai and T. P. Ma, *IEEE Electron Device Lett.*, **10**(1989), 141.
- [2] Y. Nishioka, E. F. da Silva, Y. Wang and T. P. Ma, *IEEE Electron Device Lett.*, **9**(1988), 38.
- [3] Y. Wang, Y. Nishioka, T. P. Ma and R. C. Barker, *Appl. Phys. Lett.*, **52**(1988), 573.
- [4] T. Q. Zhang, J. L. Liu, Z. X. Zhang and Y. F. Zhao, *Acta Electronica Sinica*, **23**(1995), 88(in Chinese).
- [5] H. H. Tseng, M. Orlovski, P. T. Tobin and R. L. Hance, *IEEE Electron Device Lett.*, **13**(1992), 14.
- [6] T. Q. Zhang, J. J. Li, J. L. Liu and Y. F. Zhao, *Chinese Journal of Semiconductors*, to be published(in Chinese).
- [7] J. L. Liu, T. Q. Zhang, J. J. Li and Y. F. Zhao, *Acta Physica Sinica*, **46**(1997), 1580(in Chinese).
- [8] B. A. MacIver and E. Greenstein, *J. Electrochem. Soc.*, **124**(1977), 273.
- [9] M. Y. Tsai, D. S. Day and B. G. Streetman, *J. Appl. Phys.*, **50**(1979), 188.

ANALYSIS AND SIMULATION OF FLUORINE MIGRATION CHARACTERISTICS OF BF_2^+ -IMPLANTED INTO POLYCRYSTALLINE SILICON GATE*

ZHANG TING-QING LI JIAN-JUN LIU JIA-LU

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

ZHAO YUAN-FU

(Lishan Microelectronics Institute, Lintong 710600)

(Received 6 August 1997; revised manuscript received 29 September 1997)

ABSTRACT

The migration equation of fluorine in polycrystalline silicon gate is presented on the basis of analysis for the migration characteristics of fluorine in polycrystalline silicon gate after BF_2^+ is implanted into polycrystalline silicon gate. The distribution of fluorine in polycrystalline silicon gate is simulated by the finite difference methods. The simulation results are in good agreement with the experiments. Under the condition of 80 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{BF}_2^+$ implanted into polycrystalline Si gate and then annealed at 900 °C for 30 s, some important coefficients are given as follows: emission coefficient of fluorine in polycrystalline silicon $e = 6 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, diffusion coefficient of fluorine in grain boundary $D_b = 7.64 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$, absorption coefficient of fluorine in polycrystalline Si/SiO₂ interface $S_1 = 1.74 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ and damage absorption coefficient of fluorine in polycrystalline silicon $S_1^* = 7.32 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

PACC: 6170T; 6170A; 6170W

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China.