

为 SIMOX SOI 结构的硅膜和 二氧化硅埋层厚度模型

牛国富 阮刚

(复旦大学微电子学研究所 上海 200433)
(中国科学院上海冶金研究所 离子束开放实验室 上海 200050)

摘要 本文提出了一个为 SIMOX SOI 结构的硅膜和二氧化硅埋层厚度解析模型, 适用于 $0.7-2.0 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 剂量范围和 50—300keV 能量范围. 模型与实验测量在大剂量和低能量情况下仍符合较好. 本模型对 SIMOX 工艺优化设计和发展 VLSI TCAD 具有参考价值, 同时给出了在常规氧注入能量 (如 150keV) 下用增大剂量方法制备 TF SOI 结构的理论依据.

EEACC: 2550B,2560B,2530F

1 引言

SIMOX SOI 结构已被广泛应用于 SOI 器件的研制, 并已有商品出现, 但目前还缺乏有关工艺模拟的模型. 因为硅中大剂量氧注入的机理较为复杂, 因而对其注入分布较难预估. 原有的许多计算离子注入分布的程序, 如 TRIM-89^[1], 在低剂量注入时给出较为满意的结果, 但大剂量时由于显著的表面溅射, 体积膨胀和注入期间扩散, 退火时化学分凝等原因, 无法用 TRIM-89 这类程序来预估其分布情况.

Maydell-Ondrusz 等^[2]采用分段步骤按剂量增量考虑靶组分变化求注入分布, Jager^[3]求解了注入过程中质量输运方程. Bussmann 等^[4]以 TRIM-89 为基础发展了一个 IRIS 程序求氧注入分布. 这些模型都需要一些拟合参数, 且都需要进行大量的数值试验, 无法得到一个简洁的表达式用于 SIMOX 工艺模拟及设计. Thomas 等^[5]曾给出了一个硅膜厚度的简单表达式, 但大剂量时与实验偏离过大, 也不适用于低能情况 ($E < 150 \text{keV}$).

本文基于表面溅射, 体积膨胀和注入期间扩散, 退火时化学分凝等效应的考虑, 提出了一个描述 SIMOX SOI 结构两个最重要参数硅膜厚度 t_{Si} 和二氧化硅埋层厚度 t_{Ox} 的解析模型, 并同有关实验结果进行了比较, 依据此模型, 预估了在常规氧注入能量 (如 150 keV) 下为形成硅膜厚度小于 1000 Å SIMOX SOI 结构所需的氧注入剂量.

2 模型

SIMOX 工艺与其它硅中离子注入工艺的最大区别在于其退火特性, 退火后氧分布向

中心平顶区收缩,形成新相二氧化硅埋层。大量实验表明:经过足够温度时间的退火,能够得到具有陡直界面(SiO_2/Si)的 SOI 结构。因此对 SIMOX 工艺的研究,人们关心的两个最重要参量是最终的二氧化硅埋层厚度 t_{ox} 和硅膜厚度 t_{si} ,下面依次叙述 $t_{\text{ox}}, t_{\text{si}}$ 的模型。

2.1 二氧化硅埋层厚度 t_{ox} 模型

绝大多数注入氧原子用于形成 SiO_2 ,若选用工艺条件能使形成的 SiO_2 层密度均匀,则最后二氧化硅埋层厚度 t_{ox} 为

$$t_{\text{ox}} = \frac{\phi}{\rho_{\text{ox}}} \quad (1)$$

其中 ϕ 为注入剂量, ρ_{ox} 为所形成二氧化硅埋层中氧的密度。

ρ_{ox} 同形成 SiO_2 的工艺密切相关,取决于 SiO_2 本身的密度 ρ_{SiO_2} ($\rho_{\text{ox}} = 2\rho_{\text{SiO}_2}$) 热生长 SiO_2 密度范围为 $(2.1-2.3 \times 10^{22} \text{cm}^{-3})$,主要决定于氧化过程中水分含量的多少;石英晶体的 SiO_2 密度高达 $2.65 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$,因为其中没有水分;SIMOX 工艺形成 SiO_2 过程中不含水分,但具有非晶组分, SiO_2 密度应比石英晶体低,可能比较接近于溶凝石英 ($\rho_{\text{SiO}_2} = 2.19 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$)。由于根据(1)式和不同注入条件下实验测得的 t_{ox} 计算得到 ρ_{ox} 有一定离散,我们取其平均值 $4.42 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$,为模型公式(1)中的 ρ_{ox} 值。

2.2 硅膜厚度 t_{si} 模型

对 t_{si} 的正确建模,必需正确考虑表面溅射,体积膨胀和注入期间扩散,退火时化学分凝等效应对最终 t_{si} 的影响。对上述效应的考虑分述如下:

2.2.1 表面溅射 这一效应的考虑,可通过表面溅射系数 S_{si} ,其大小取决于注入能量。 S_{si} 的变化范围为 0.32/离子 (50keV)—0.13/离子 (300keV),其值由 TRIM-89 计算得到,已有人对 200keV 氧注入硅的 TRIM-89 理论计算值与实验结果进行了比较,附合很好^[8]。知道了 S_{si} 后,我们就可以用一个简单公式计算溅射引起的表层硅厚度减少量 t_{sp}

$$t_{\text{sp}} = \frac{\phi S_{\text{si}}}{\rho_{\text{si}}} \quad (2)$$

其中 ρ_{si} 为单晶硅中原子密度, $\rho_{\text{si}} = 5.0 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$ 。

实际工艺中,硅片表面可能有一层覆盖氧化层,以提高表面质量,这种情况下当计量超过 ϕ_{ov} 时, t_{sp} 项才起作用

$$t_{\text{sp}} = \frac{(\phi - \phi_{\text{ov}}) S_{\text{si}}}{\rho_{\text{si}}} \quad (3)$$

$$\phi_{\text{ov}} = \frac{\rho_{\text{ov}} t_{\text{ov}}}{S_{\text{ov}}} \quad (4)$$

其中 ρ_{ov} 为表层 SiO_2 密度, S_{ov} 为表层 SiO_2 表面溅射系数。

2.2.2 体积膨胀和注入期间扩散 注入氧与 Si 发生化学反应会造成体积膨胀,我们假定由化学反应消耗的表面硅层 t_{ch} 与注入剂量 ϕ 成线性关系。实验发现,注入剂量超过一阈值剂量 ϕ_c 时,才会在注入期间分布出现平顶,形成埋层氧。

注入剂量 $\phi \leq \phi_c$ 时,完全靠注入分布向中心收缩形成埋层氧。对表层硅的消耗

t_{ch} 为

$$t_{ch} = S_{ch} \frac{t_{ox}}{2} \quad (5)$$

S_{ch} 为反应消耗的硅与反应形成的 SiO_2 的厚度比, $S_{ch} = 0.45$.

注入剂量 ϕ 超过 ϕ_c 后, 超出化学剂量比浓度 ρ_{ox} 的氧将向两侧扩散(氧在 Si 中的固溶度很低), 与 Si 反应形成 SiO_2 , 这种扩散很可能不是左右对称的进行, 因为在埋层 SiO_2 与 Si 的前界面不断有大量的硅间隙原子产生, 损伤分布主要集中在前界面, 由此造成氧原子扩散的化学驱动力前界面比后界面要强. 在 IRIS 中认为超过 ϕ_c 以后氧全部向前界面扩散^[4], 我们则认为存在一分配系数 γ , γ 定义为超过 ϕ_c 以后扩散向前界面的氧总量与总的超过 ϕ_c 的剂量之比, 这样对表层 Si 的消耗量 t_{ch} 为

$$t_{ch} = S_{ch} \left(\phi - \frac{\phi_c}{2} \right) \frac{\gamma}{\rho_{ox}} \quad (6)$$

对 ϕ_c 我们采用一个经验表达式^[7]

$$\phi_c = \sum_{i=1}^3 b(i) E^i \quad (7)$$

γ 参数, 我们采用实验提取的办法得出, 在 $E \geq 150\text{keV}$ 情况下, γ 变化很小, 其值为 0.88. 对 $E < 150\text{keV}$, 实际工艺尚不成熟, 目前还缺乏足够的实验数据来提取 γ , 为使模型在低能注入时适用, 同时考虑到低能注入时损伤并不严重, 剂量分配比 γ 减小, 我们采用线性近似式(8)来计算 γ

$$\gamma = 0.88 \frac{E}{150} \quad (E < 150\text{keV}) \quad (8)$$

2.2.3 化学分凝 1300°C 以上的高温退火使注入氧能够全部发生化学分凝, 形成类矩形分布^[6]. 对 $\phi \leq \phi_c$ 的情况, 认为退火使其分布向中心收缩形成 SiO_2 埋层. 如图 1 所示. 对 $\phi > \phi_c$ 的情况, 氧原子向其最近的 SiO_2/Si 界面分凝, SiO_2/Si 界面朝表面和体内两个方向分别移动直至全部氧分凝形成稳定的氧埋层. 如图 2 所示.

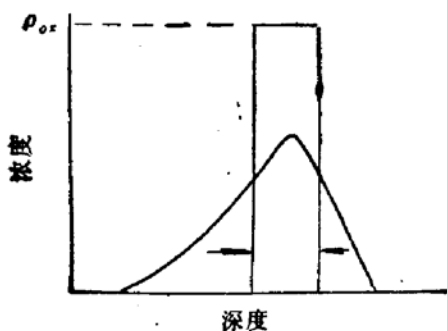


图 1

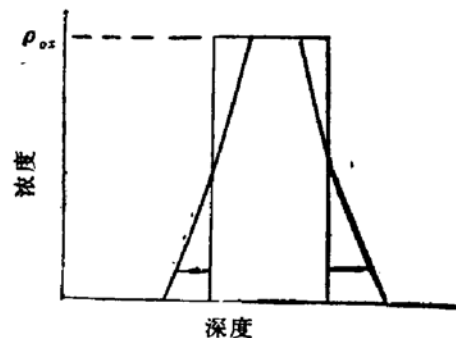


图 2

众所周知, 低剂量时注入分布目前最为可靠的理论计算程序是 TRIM-89. 氧注入 Si 和 SiO_2 的分布和分布参数(平均投影射程 R_p 和标准偏差 ΔR_p) 基本一致. (见表 1) 这一点使我们处理问题得以简化, 不再考虑氧在 Si 和 SiO_2 中分布参数的改变. 表 1 给出了氧在 Si 和 SiO_2 中 $R_p, \Delta R_p$ (Å) 比较.

表 1

$E(\text{keV})$	$R_{\text{pSi}}(\text{\AA})$	$R_{\text{pSiO}_2}(\text{\AA})$	$\Delta R_{\text{pSi}}(\text{\AA})$	$\Delta R_{\text{pSiO}_2}(\text{\AA})$
50	1104	1116	420	375
100	2150	2170	661	588
150	3143	3166	836	735
200	4085	4086	972	845
300	5794	5724	1167	1000

根据以上分析,最终得到表面硅膜厚度 t_{Si} 为

$$t_{\text{Si}} = R_{\text{p}} \cdot \cos\theta - t_{\text{Si}} - t_{\text{ch}} \quad (9)$$

R_{p} 代表低剂量时氧注入平均投影射程, θ 代表注入角度。

3 模型验证

表 2 给出了 $\phi = 1.2 - 1.7 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$, $E = 150 \text{keV}$, 退火条件为 1330°C , 6h , t_{Si} 和 t_{ox} 的模拟结果与实验数据^[5]的比较。

表 2

$\phi(1 \times 10^{18} \text{cm}^{-2})$	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$		$t_{\text{ox}}(\text{\AA})$	
	模拟	实验	模拟	实验
1.2	1895	1865	2717	2775
1.3	1839	1795	2944	2970
1.4	1700	1745	3170	3135
1.5	1556	1610	3397	3475
1.6	1414	1410	3623	3600
1.7	1273	1250	3850	3775

其中 $S_{\text{Si}} = 0.26/\text{离子}$, $\gamma = 0.88$

表 3 给出了 50—200keV 范围内不同剂量下,本模型对 t_{Si} 、 t_{ox} 计算结果与文献[8]中报道的不同测量方法测得结果,IRIS 程序模拟结果的比较。

表 3

$E(\text{keV})$	$\phi(1 \times 10^{18} \text{cm}^{-2})$	RBS ^{b)}		IRIS		其 他		模 拟	
		$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{ox}}(\text{\AA})$	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{ox}}(\text{\AA})$	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{ox}}(\text{\AA})$	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{ox}}(\text{\AA})$
50	0.7	450	1500	500	1400	600 ^{c)}	1700 ^{c)}	477	1590
70	0.7	800	1820	1000	1400	750 ^{a)}	1400 ^{a)}	909	1590
90	0.7	1450	1600	1600	1400			1316	1590
140	0.7	3860	1600	2600	1400	2700 ^{c)}	1450 ^{c)}	2220	1590
140	1.0	3000	2400	2100	2150			1906	2270
200 ^{d)}	1.8	3000	4000	2150	3850			2307	4080

a) XTEM b) RBS, 测量误差 170A c) SIMS, 测量误差 5% d) 文献[9]

4 结果与讨论

1. 由表 2 实验数据与模拟结果的比较可以看出, $E=150\text{keV}$, $\phi=1.2-1.7 \times 10^{18}\text{cm}^{-2}$ 范围内本模型与实验数据能符合很好。(10% 以内)。用剂量分配比 γ 的线性近似使本模型在低能注入时仍给出较为满意的结果(见表 3)。

2. 由于模型在较大范围内与实验符合较好, 使我们能以模型为基础对 SIMOX 工艺进行优化设计。为达到一定的 t_{Si} , 确定了注入能量后, 可计算或查表得到对应的 R_p 、 ϕ_c 、 S_{Si} 根据式(2)、(3)、(5)、(6)、(9), 可以方便地求解所需剂量 ϕ 。

常规工艺中, 通常注入能量范围为 150—200keV, 注入剂量 ϕ 满足 $\phi > \phi_c$, 根据(9)式, 为达到 t_{Si} 小于等于某一定值 t , 要求

$$t_{\text{ep}} + t_{\text{ch}} \geq R_p \cos \theta - t \quad (10)$$

将 $t_{\text{ep}}, t_{\text{ch}}$ 的表达式(2)、(6)代入(10)式, 注入剂量应满足

$$\phi \geq \frac{R_p \cos \theta - t + S_{\text{ch}} \frac{\phi_c \gamma}{2\rho_{\text{ox}}}}{S_{\text{ch}} \gamma \frac{1}{\rho_{\text{ox}}} + \frac{S_{\text{Si}}}{\rho_{\text{Si}}}} \quad (11)$$

(11)式可作为 SIMOX 工艺进行优化设计的依据, 供设计人员参考。

3. 全耗尽 SOI 器件近来受到广泛研究, 许多 SIMOX 材料专家开始把注意力转向用低能注入制备 $t_{\text{Si}} \leq 1000 \text{\AA}$ 的 TF SOI(薄膜 SOI) 结构^[6], 迄今这方面还没有得出满意的结果。Robinson 等^[6]的实验结果表明, $E = 70\text{keV}$, $\phi = 0.7 \times 10^{18}\text{cm}^{-2}$, 经适当退火仍不能形成陡直的 SiO_2/Si 界面。在低能注入形成 TF SOI 结构工艺未成熟以前, 可在常规注入能量下采用适当增大剂量的方法。增大的具体值可用(11)式进行计算。以 $E = 150\text{keV}$ 为例, 为得到 $t_{\text{Si}} \leq 1000 \text{\AA}$ 的 TF SOI 结构, 按(11)式计算得到 $\phi \geq 1.9 \times 10^{18}\text{cm}^{-2}$ 。由于剂量愈大, 对硅基片的损伤愈严重, 所以可取略大于 $1.9 \times 10^{18}\text{cm}^{-2}$ 的值进行试验。这比实验得到 $t_{\text{Si}} = 1410 \text{\AA}$ 的 SOI 结构所用的 $\phi = 1.6 \times 10^{18}\text{cm}^{-2}$ 增加在 20% 以内。仍有可能得到质量较高的 TF SOI 结构。

参 考 文 献

- [1] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and G. Cuomo, TRIM-89.
- [2] E.A. Maydell-Ondrusz and I.H. Wilson, *Thin Solid Films*, 1984, **114**: 357.
- [3] H.U. Jager, J.A. Kilner, R.J. Chater, P.L.F. Hemment, R.F. Peart and K.J. Reeson, *Thin Solid Films*, 1988, **161**: 333.
- [4] U. Bussmann and P.L.F. Hemment, *Nucl. Instr. and Meth.*, 1990, **B47**: 22.
- [5] T.W. Macelwee, I.D. Calder, R.A. Bruce and F.R. Shepherd, *IEEE Trans. on Electron Devices*, 1990, **37**: 1444.
- [6] U. Bussmann, A.K. Robinson and P.L.F. Hemment, *Nucl. Instr. and Meth.*, 1991, **B55**: 852.
- [7] G. Ruan and D.W. Zheng, VLSI Process/Device Modeling Workshop, Kawasaki, Japan, 46 (1990).
- [8] A.K. Robinson, C.D. Marsh, U. Bussmann, J.A. Kilner, Y. Li, J. Vanhellemont, K.J. Reeson, P.L.F. Hemment and G.R. Booker, *Nucl. Instr. and Meth.*, 1991, **B55**: 555.
- [9] J.R. Davis, A.E. Glaccum, K. Roeson and P. Hemment, *IEEE Electron Device Letters*, 1986, **7**: 570.

Analytical Model of Silicon Top Layer and Buried Oxide Layer Thicknesses for SIMOX SOI Structure

Niu Guofu and Ruan Gang

(*Institute of Microelectronics, Fudan University, Shanghai 200433*)
(*Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai 200050*)

Abstract An analytical model of silicon top layer and buried oxide layer thicknesses for SIMOX SOI structure is developed. It covers the dose range of $0.7\text{--}2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ and the energy range of $50\text{--}300\text{keV}$. The calculated results of this model are compared to experiments and IRIS simulation. Good agreement with experiments is obtained. Based on this model, the method of forming SOI structure with silicon overlayer of 1000 \AA thickness or less by increasing the dose in the usual energy range of $150\text{--}200\text{keV}$ is proposed.

EEACC: 2550B, 2560B, 2530F