

超大规模集成电路制造工艺的 计算机辅助设计

[美] J. D. 普卢默 等 著

科学出版社



73.7551
6.51

超大规模集成电路制造工艺的 计算机辅助设计

〔美〕 J.D. 普卢默 等著

刘永昌 王沛霖 郭志先 译

范新弼 校



科学出版社

1986

8610254

内 容 简 介

本书比较全面地介绍了超大规模集成电路制造工艺的计算机辅助设计。内容包括：氧化、扩散、离子注入、化学汽相淀积、界面杂质分凝等模型及其模拟程序的执行过程。

书中论述了现有的理论公式、经验公式或因数据有限未能建立经验公式等三类物理化学问题在计算机上实现模拟的方法。

本书可供集成电路设计与研制以及使用计算机从事物理化学研究的人员参考，也可作有关专业的研究生、高年级大学生的教学参考书。

J. D. Plummer etc.

COMPUTER-AIDED DESIGN OF INTEGRATED CIRCUIT FABRICATION PROCESSES FOR VLSI DEVICES

Stanford University, 1981

超大规模集成电路制造工艺的计算机辅助设计

〔美〕J. D. 普卢默 等著

刘永昌 王沛霖 郭志先 译

范新弼 校

责任编辑 黄岁新

科学出版社出版

北京朝内门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1986年3月第一版 开本：787×1092 1/16
1986年3月第一次印刷 印张：12 3/4
印数：0001—2,700 字数：286,000

统一书号：15031·704

本社书号：4176·15—8

定 价：3.00 元

1050102

译 者 的 话

本书译自美国斯坦福大学 (Stanford University) 集成电路实验室 1981 年技术总结报告, 详细地介绍了超大规模集成电路制造工艺的第三代模拟程序 SUPREM II (Stanford University Process Engineering Modeling Program)。近来, 他们又为 SUPREM 程序做了一些改进工作。在本书附录一, 译者将根据该实验室 1983 年的报告, 对这些改进作一简要介绍。

为了使超大规模集成电路系统 (VLSI System) 的设计工作逐步实现自动化, 在版图设计之前, 往往需要进行系统级、逻辑级、电路级和器件级的分析和模拟, 在器件制造之前, 则需要做工艺级模拟。其中, 工艺模拟是整个工作的基础。

所谓工艺模拟, 就是通过计算机一系列运算, 对集成电路制造过程中的实际物理和化学变化进行模仿。这涉及三种情况: (1) 已经有了较深入研究并建立了理论公式, 这属于常规科学计算, 按常规问题处理, 即物理或化学过程→数学模型→近似计算公式→计算程序→计算机运算→输出结果。(2) 根据大量实验数据建立了经验公式。尽管对问题的机理并不十分清楚, 但是计算机可以对经验公式进行运算, 预测特定条件下的结果。(3) 理论上还没作深入研究, 而且实验数据又少, 尚未建立经验公式。这类问题通过计算机, 以有限已知数据为基点, 运用内插和外推算法, 补充实验数据点之间的数据, 外推已知数据区间之外的数据, 建立模拟规律。

本书对上述三种情况都作了详细论述, 同时也全面介绍了物理和化学实验方法。

由于许多术语尚未统一, 故译文大部分遵照较通用译法。原文中有一些错误, 我们作了订正并加了注解。

参加本书翻译工作的还有刘河、孙祖稀等同志。限于水平, 肯定有一些缺点, 希望读者批评指正。

序 言

本书主要目的是介绍一种面向用户的,微细结构超大规模集成电路(VLSI)制造工艺模拟程序的开发与实现情况。这些工作依据既定计划,研制出并公开了第二代工艺模拟程序 SUPREM II。一般认为, SUPREM II 是当今这类程序中最优者之一。目前100多家*工业公司和大学研究小组采用了这个程序,以此模拟和设计现代的 MOS 和双极集成电路制造工艺。根据本合同年度工作安排,1981 年将公开 SUPREM III,它对新型集成电路技术中所用的多层结构将首次进行模拟。最近五年,这项计划基本目标是研究 SUPREM III 程序所用的精确物理模型。本书所述内容还涉及今后几年在 VLSI 电路中可能采用的微细结构器件和多层结构的某些模型,以及它们在 SUPREM 程序中的执行过程。

集成电路技术越来越复杂,其有源器件越来越小。现在,许多市售电路的器件横向尺寸已小至 2—3 微米;而纵向尺寸已低于 1 微米。从基本物理机制讲,这些尺寸无疑还会进一步缩小一个数量级。关于这种器件结构的发展,已对1990年和更远的年代做了广泛的设想,不过,这些设想都是根据我们对这种器件制造工艺的具体理解和准确的模拟能力作出的。

就尺寸较大(大于 5 微米)和工艺容差较宽的粗线条结构器件**而言,简单的模型就足以确定按一定工序生产的纵向器件结构。但是,由于纵横两个方向尺寸的缩小,要想得到结构的精确模拟,就得使用更完善的工艺模型,并且要考虑各工序纵横方向上的相互作用。这些问题不仅对于当今的 2—3 微米器件来说是重要的,而且对于超小型亚微米级器件来说更是如此。

粗线条结构的器件,可按一维结构成功地模拟。工艺模型和电学特性模型,都可以这样做,然而,为了精确模拟,横向尺寸小于几个微米的器件,就要求使用二维模型。最近几年,这种需要促使我们在器件二维电学特性模型方面,进行了大量的研究工作。因此,我们对微细结构器件物理机制的理解明显地深化了。

然而,二维工艺模拟工作进展并不那么快。直接原因是,我们需要改进氧化、离子注入、扩散和化学汽相淀积(CVD)的物理模型。显然,这些工艺不是一维的。最近的试验结果已清楚地表明,硅衬底局部区域氧化或杂质扩散能严重影响到衬底纵横方向上邻近区域的氧化或扩散的速度。目前,对造成上述结果的基本物理机制,还没有一致的见解。但显而易见,如果我们想准确地模拟微细器件结构,就必须对这类现象作定量的

* 据1983年报告,现在已发展到150家。——译者注

** 粗线条结构器件的横向尺寸大于 5 微米,纵向大于或等于 1 微米,它的制造工艺按 MOS 器件称 5 微米技术。微细结构器件的横向尺寸为 2—3 微米或更小,纵向小于 1 微米,其工艺有 2 微米技术、1 微米技术和亚微米技术之说。前者的器件电气特性和工艺,按纵向一维分析;后者则必须考虑纵横方向上的二维效应。SUPREM III 是专为微细结构器件所开发的工艺模拟程序。同时 SUPREM III 也适用于微细结构双极工艺。——译者注

了解。

这项研究计划的一个特定目标就是了解和模拟这些二维效应。去年，我们已在这方面取得了实质性的进展。根据这项计划以及其它计划的研究工作，现在看来，在杂质扩散、热氧化和其它工艺过程中的这些相互作用的基本物理现象，是硅衬底中的点缺陷——硅空位和硅填隙——的作用结果。在高温工序里的这些点缺陷的产生和消退，可能是解释很多迄今还被认为是异常现象的综合物理效应。我们已用这类模型定量地解释了种种工艺现象，并且把其中一些模型编入 SUPREM II 程序。在 SUPREM II 中将有更多这样的模型。

因此，这项研究计划的总目标过去是，现在仍然是：

(1) 研究硅集成电路生产中诸如氧化、离子注入、扩散和 CVD 之类的基本工艺的精确物理模型。

(2) 研究这些工艺相互作用的精确物理模型，譬如在氧化条件下扩散系数的增加。

(3) 研究以硅点缺陷为基础的微细结构器件二维工艺现象的精确物理模型。

(4) 研究实验微细器件结构特性的高分辨率分析工具。

(5) 在 SUPREM II 中应用改进的工艺模型，使该程序能精确地模拟微细结构器件和多层结构。

(6) 把研究成果移植到国防工业中去。

因为这是一个相当成熟的研究项目，所以下面我们将概要地介绍有关 SUPREM 程序及其工艺模型的现状。本序言只介绍整个程序的概貌，并且为以后各篇的更详细论述做背景说明。后面几篇将介绍去年的具体工作和将来的设想。

目 录

译者的话

序言

一、SUPREM 程序现状	1
1.1 热氧化	2
1.2 离子注入	6
1.3 扩散	12
1.3A 磷	15
1.3B 砷	16
1.3C 氧化增强扩散	17
1.3D 预淀积和界面分凝	18
1.4 外延	19
1.5 化学汽相淀积 (CVD)	21
1.6 材料研究	25
1.7 SUPREM 程序的实现途径	32
参考文献	37
二、去年主要成果	41
2.1 热氧化	41
2.2 离子注入和扩散	41
2.3 化学汽相淀积	42
2.4 材料研究和界面物理	42
2.5 扩充SUPREM程序	42

详细技术报告

三、高压氧化	44
3.1 引言	44
3.2 实验过程	44
3.3 结果和讨论	45
3.4 小结	49
参考文献	50
四、薄层氧化生长动力学	51
4.1 引言	51
4.2 实验技术——椭圆偏振光测厚仪原位测量	53
4.3 轻掺杂硅在100%氧气中氧化	56
4.4 小结	57

参考文献	58
五、掺氟氧化动力学——SUPREM 程序扩充	59
参考文献	61
六、氧化工艺微观动力学模拟	62
参考文献	67
七、离子注入射程统计	68
7.1 引言	68
7.2 射程统计的玻尔兹曼输运方程法	69
7.3 氧反冲射程分布	70
7.4 银膜注氮引起的银反冲产额	72
7.5 化合物半导体理想配比紊乱	74
7.6 小结	75
参考文献	76
八、多晶硅电阻率	77
8.1 引言	77
8.2 最近成果概述	77
8.2.1 LPCVD (低压化学汽相淀积) 硅的结构性质	78
8.2.2 LPCVD 硅的电学性能	78
8.2.3 多晶硅中掺杂剂分凝	78
8.2.4 多晶硅电导新模型	78
8.2.5 电导理论模型与实验数据比较	78
8.3 多晶硅电导理论模型	79
8.3.1 改进模型的必要性	79
8.3.2 理论模型要素	79
8.3.3 载流子输运	81
8.3.4 电流-电压关系	83
8.4 电导理论模型与实验数据比较	88
8.4.1 晶粒间界参数的确定	90
8.4.2 用理论模型预测电阻率	91
8.5 小结	93
参考文献	93
九、多晶硅热氧化	95
9.1 引言	95
9.2 实验结果和讨论	96
9.3 小结	100
参考文献	100
十、多晶硅晶粒生长机理	101
10.1 引言	101
10.2 实验	101
10.3 多晶硅的晶粒生长机理	102

10.4 结果和讨论	104
10.5 小结	107
参考文献	108
十一、掺杂多晶硅/硅结构的氧化增强扩散	109
11.1 引言	109
11.2 实验和结果	109
参考文献	115
十二、用于互连的难熔金属硅化物	116
12.1 引言	116
12.2 硅化钨栅 MOS 电容	117
12.3 硅化钨栅 MOS 晶体管	121
12.4 小结	123
参考文献	124
十三、研究流程中各工艺特性的难熔金属硅化物	126
13.1 引言	126
13.2 耐高温电极制备工艺的开发	127
13.3 小剂量注入的退火	128
13.4 大剂量注入的退火与损伤吸杂	128
13.5 小结	129
参考文献	129
十四、氯在二氧化硅中输运与嵌入的俄歇谱和离子质谱研究*	131
14.1 引言	131
14.2 实验技术	133
14.3 氯在二氧化硅中输运的理论研究	137
14.4 实验结果	140
14.5 模拟氯输运和嵌入	144
14.6 讨论	147
14.7 小结	151
参考文献	151
十五、硅/二氧化硅界面掺杂剂分凝	153
15.1 引言	153
15.2 实验测量	153
15.3 掺杂剂分凝理论机制	157
15.3.1 可能键力综述	157
15.3.2 分凝掺杂剂电学特性	159
15.3.3 界面原子排列	161
15.4 小结	163
参考文献	163
十六、用于材料分析的各种波谱技术	164

16.1 引言	164
16.2 二次离子质量谱 (SIMS)	164
16.3 卢瑟福背散射谱 (RBS)	166
16.4 电子能谱 (AES 和XPS)	167
16.5 比较综述	168
参考文献	168
十七、SUPREM 工艺模型的执行过程	170
17.1 引言	170
17.2 SUPREM II 程序中的氧化和杂质再分布效应	171
17.3 SUPREM程序工艺模型执行过程	174
17.4 SUPREM III 程序的多层工艺模拟	178
17.5 小结	183
参考文献	184
附录 最新成果	186

一、SUPREM 程序现状

本书在详细讨论下述各篇之前,回顾一下目前 SUPREM 程序的结构和所用物理模型是有益的。这个模拟程序的宗旨是使工艺器件设计者能够用它精确地模拟硅集成电路制备工艺的全过程。程序输入,实际上是一个工艺流程表,按先后次序输入规定的具体时间、温度、气氛、淀积、离子注入剂量与能量以及预淀积等工艺参数。在 SUPREM I 中,每步工序之后得到的程序输出是硅衬底或覆盖有二氧化硅 (SiO_2) 层的硅衬底中的一维杂质分布; SUPREM II 程序却能处理在硅衬底、二氧化硅层或者硅衬底及二氧化硅层二者之上,覆有像多晶硅之类附加材料层的多层结构。该结构中的每层厚度和杂质分布,均可用各步工序的模拟程序计算。

SUPREM 的基本结构见图 1.1。设计这个程序目的在于,单独的或连贯的模拟所有各种工序,就象在集成电路实际制造过程中所进行的那样。除了杂质分布和各层厚度,

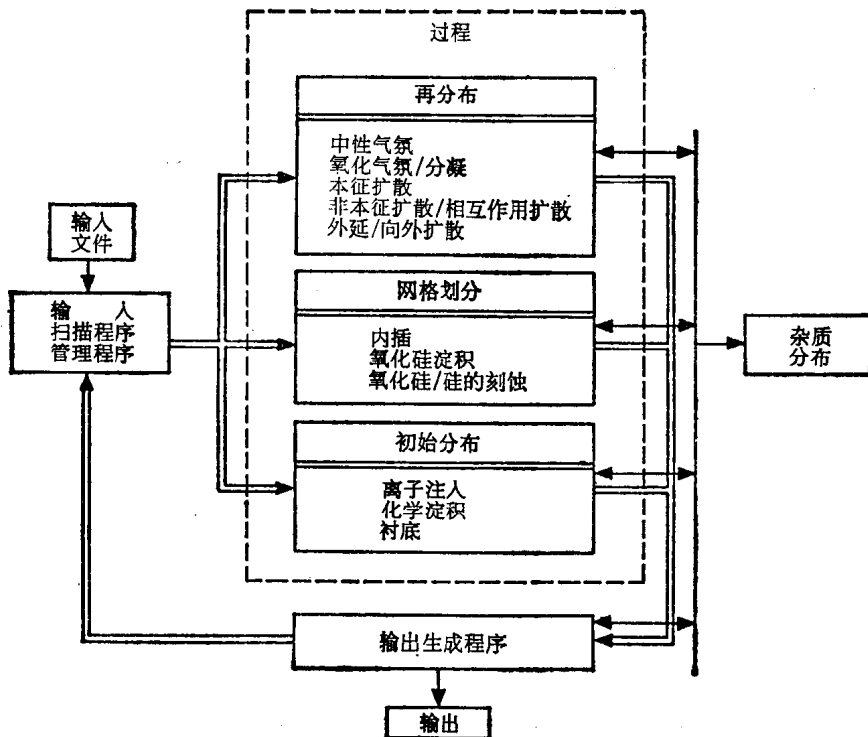


图1.1 SUPREM 工艺模拟程序的结构

该程序还能计算,结深、薄层电阻、MOS 阈值电压。由早期的 SUPREM II 得到的一个典型结果示于图 1.2。下述各节,介绍用于 SUPREM 程序的各基本工艺模型^[1.1, 1.2]。

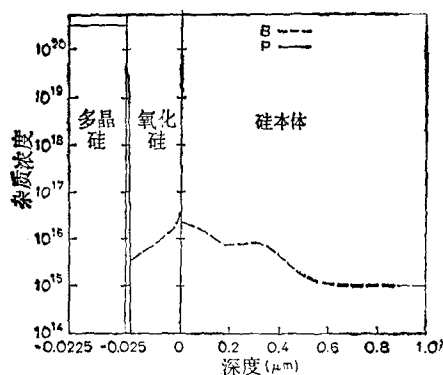


图1.2 由早期的 SUPREM II 程序模拟得到的多层杂质分布

1.1 热 氧 化

硅上二氧化硅的生长速率，历来用众所周知的线性-抛物线生长定律表示^[1.8]：

$$\frac{x_0^2}{B} + \frac{x_0}{B/A} = t + \tau \quad (1.1)$$

式中， x_0 为氧化层厚度； t 为时间； B 和 B/A 分别为抛物线、线性速率常数。 B 正比于氧化剂在二氧化硅中的溶解度（因而，正比于氧化剂的分气压）和扩散系数； B/A 也正比于氧化剂溶解度（因而，也正比于分气压）和硅/二氧化硅界面处的反应速率常数 k_s 。

参数 τ 同 $t=0$ 时的氧化层初始厚度 x_i 有关，由下式确定

$$\tau = (x_i^2 + Ax_i) / B \quad (1.2)$$

τ 也被用来修正式(1.1)，以适应于氧化层厚度达200埃之前的“奇异”快速生长情况。

在较低的掺杂浓度、干氧或水汽氧化条件下， B/A 仅同硅晶向有关。并且当温度 $T > 900^\circ\text{C}$ 时， B 和 B/A 两者只是温度的激活函数；而在较低的温度下，这两个速率常数反映了相应激活能的变化^[1.4]。

已经证实，在高浓掺杂衬底条件下，氧化速率加快^[1.5]。我们的工作^[1.6-1.8]确认，氧化速率加快的基本原因在于 B/A 或界面反应速率的增加。基本思想是，受掺杂影响的衬底晶格空位密度决定着氧化速率的大小。

按照这个模型，线性速率常数可写为

$$B/A = (B/A)^i [1 + \gamma(C^T - 1)] \quad (1.3)$$

式中， $(B/A)^i$ 是本征（低浓度）速率常数； γ 是实验确定的参数，由下式给定

$$\gamma = 2.62 \times 10^8 \exp(-1.10\text{eV}/kT) \quad (1.4)$$

C^T 是归一化的晶格空位总浓度，即

$$C^T = \frac{1 + C^+ \left(\frac{n_i}{n} \right) + C^- \left(\frac{n}{n_i} \right) + C^- \left(\frac{n}{n_i} \right)^2}{1 + C^+ + C^- + C^-} \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned}
\text{式中} \quad C^+ &= \exp[(E^+ - E_i)/kT] & E^+ &= 0.35\text{eV} \\
C^- &= \exp[(E_i - E^-)/kT] & E^- &= E_g - 0.57\text{eV} \\
C^- &= \exp[2(E_i - E^- - E^-)/kT] & E^- &= E_g + E^- - 0.11\text{eV}
\end{aligned}$$

上面三式应看作三个不同电荷态的空位缺陷的归一化本征浓度，在硅能隙中三个电荷态各自对应三个不同态能级。还有，硅能隙 E_g 和本征能级 E_i 是温度的函数，由下式给定

$$E_g(T) = 1.17 - 4.73 \times 10^{-4} [T^2 / (T + 636)] \text{eV} \quad (1.6)$$

$$E_i(T) = E_g / 2 - kT / 4 \quad (1.7)$$

我们得到了 n 型硅抛物线性氧化速率 B 增大后的表达式

$$B = B' (1 + \delta C_T^{0.22}) \quad (1.8)$$

$$\text{式中} \quad \delta = 9.63 \times 10^{-16} \exp(2.83/kT) \text{eV} \quad (1.9)$$

B' 是本征抛物线速率； C_T 是 n 型杂质原子总浓度（化学比）。

氧化期间因扩散和分凝的影响会使硅表面杂质浓度发生变化，因此， B/A 和 B 增大后的计算值，通常可能与时间有关。为了利用传统的氧化生长公式 (1.1) 进行模拟氧化，我们使用了该式的增量形式

$$\Delta x_0 = \frac{1}{2} \left\{ -(2x_0 + A) + \sqrt{(2x_0 + A)^2 + 4B\Delta t} \right\} \quad (1.10)$$

这样，随着模拟时间以小的增量 Δt 延续，硅中杂质呈现再分布。系数 A 和 B 由每个 Δt 对应的表面杂质浓度求得，由此可计算出相应的氧化层厚度增量 Δx_0 。

式(1.1)表明， B 和 B/A 线性正比于氧化剂的压力。去年收集到的 1—25 个大气压高温合成水汽氧化的大量实验数据证实了这一点^[1.9]。有了这些成果，就很容易把这一新模拟能力编入 SUPREM II 程序中。当前开展的工作是要确定干氧化也有类似的关系，如本书后面各篇所述。

这项研究收集到的数据^[1.10]证明，热氧化时氧中加入少量水汽（小于 10%）会显著增加氧化速率。由于水汽（ H_2O ）和氧气的作用互不影响，所以将这二种氧化速率线性叠加来模拟总的氧化效应^[1.10]。但这种作法并不完全成功，因为实验确定的氧化速率始终高于两种气体单独氧化时速率的叠加值。最近一篇文章^[1.11]对上述结果提出了较为合理解释。文章中假设水汽分解为 OH^- 根和 H_3O^+ 正离子团。我们至今还没研究出这类氧化的精确模型。因此，下步工作将专门研究这些问题。众所周知，氢在界面态退火中起着重要作用，因此，这项研究可能进一步阐明氧化物电荷问题。

氧化时，在氧气中加入百分之几的氯化氢（ HCl ），是制造多种器件的常用工业技术。我们积累了有关氯化氢/氧气氧化动力学的大量实验数据^[1.11, 1.12]，目前我们正致力于研制一种适于编入 SUPREM 的模型。虽然现在的数据还不足以确切地理解与氧化有关的各种机理，然而可以确定 B 和 B/A 与氯化氢浓度和温度关系的经验公式^[1.14]。这些公式和生长基本定律的增量式 (1.10) 一起，有可能在 SUPREM II 中为 HCl/O_2 氧化提供一种基本模型。

众所周知，在干氧中，二氧化硅薄层（<500 埃）的生长机理同厚氧化层的根本不同^[1.13, 1.15]。这一点直接表现为薄氧化层有较快的生长动力学过程和不同的光学、物理性质。人们还未提出有关这些结果的任何满意的解释。我们确信，SUPREM 程序一定能精确地模拟这种薄层二氧化硅，因为小于 400 埃的栅氧化层已是 MOS 超大规模集成

电路的重要组成部分。因此,在过去两年,我们在氧化领域里的主要工作就是为了解决这些问题。我们建立了专门的实验技术(氧化前原位腐蚀),并且积累了有关动力学的大量实验数据。其中大部分是最近同IBM公司沃森研究中心的艾琳(E. A. Irene)共同研究取得的^[1.16]。

我们仔细地研究了所提出的各种薄层氧化动力学的物理模型^[1.16-1.18]。但是,我们认为这些模型不是不完整,就是不正确,或者既不完整又不正确,因此,没有编入SUPREM II 程序。目前,当厚度 x_0 小于200埃时,SUPREM II 程序可用人为地提高 B/A (乘以10)的方法,模拟薄层氧化。很明显,这是不能令人满意的。目前,我们希望,在SUPREM II 程序中,能根据我们最近得到的数据加进去一个改进的经验修正系数。我们的奋斗目标是建立一个改进的物理模型^[1.16]。

氧化层电荷(固定氧化层电荷 Q_f 和界面陷阱 N_{it}),人们已知道多年。尽管很多实验室作了大量的实验和理论工作,然而时至今日,这些电荷的物理起源还不能完全理解。目前,SUPREM 程序对这些电荷没有任何预测能力。

为弥补这点不足,我们积累了大量的关于这些电荷同工艺关系的实验数据^[1.19-1.21]。这些数据为工艺设计者提供了很有用的资料,但是为SUPREM 建立一个精确的物理模型,还为时过早。我们原想让SUPREM II 包含有能够预测氧化层固定电荷 Q_f 的能力,但是,只有在我们的氧化工艺物理模拟工作(稍后介绍)比较完备之后,才能提出更完整的物理模型。

过去几年,在热氧化方面的主要工作是为完整的氧化工艺确定一个“工作模型”。这个模型,主要基于点缺陷(空位和填隙)的作用(在我们前两个年度报告中,已做了详细介绍)。它试图统一氧化反应动力学、氧化物电荷和氧化对其它工艺影响的物理机理。它的主要特点是,不仅对氧化反应动力学,而且对氧化物电荷密度和其它现象,诸如氧化增强扩散系数、氧化造成的堆垛层错的生长速率,进行定量预测。这个模型,可以看作是基本迪尔-格罗夫(Deal-Grove)模型^[1.3]的发展。特别注意了硅/二氧化硅界面反应和该反应对界面“自由空间”的需求。后面将具体讨论这种模拟的一些理论^[1.22]。这里只回顾一下基本概念。

这个模型的基础示于图1.3。气相的氧先附着于二氧化硅层表面,再向下扩散到硅/二氧化硅界面,在这里与硅反应生成二氧化硅。关于在扩散过程中有没有重要的带电氧离子,多尔马斯(Doremus)^[1.23]、乔根森(Jorgensen)^[1.24]、雷利(Rayleigh)^[1.25]以及科林斯(Collins)和中山(Nakayama)^[1.26]的论文,提出了互相矛盾的论证。米尔斯(Mills)和克罗格(Kroger)^[1.27]清楚地指出,带两个负电荷的填隙氧离子是二氧化硅高温电导的支配粒子。迪尔-格罗夫模型^[1.3]的抛物线线性速率常数 B 对压力的一阶关系似乎表明,居支配地位的扩散粒子是分子氧。目前,我们认为扩散中的特殊氧粒子问题,还没有完全解决。为确立这个工作模型,氧分子被看做是厚膜氧化的支配性扩散粒子。

氧化反应第一步,氧分子在Si/SiO₂界面分解。我们现在讨论“自由空间”的问题,它是这里所述的“工作模型”的核心。

当硅和氧粒子反应形成二氧化硅分子时,界面区一定有必要数量的“自由空间”,才能使二氧化硅分子嵌入正常的二氧化硅网格^[1.28,1.29]。从密度考虑,二氧化硅中硅原子的平均间距约为硅晶格中硅原子平均间距的1.3倍。如果硅晶格首尾相接延伸到二氧化

硅膜，那么二氧化硅膜的应变可达70%。如果界面以 V 厘米/秒的速度深入硅中，氧化层将以 $2.25V$ 厘米/秒的速度变厚。这意味着，“自由空间”必须在每平方厘米的界面面积上以 $1.25V$ 厘米/秒的速度流入，以求产生无应变氧化层；否则，以应变形式存储于二氧化硅层中的过量自由能，足以减缓正常驱动力下的氧化反应。

正如图1.3上部所示的反应，可以为氧化反应提供部分需要的“自由空间”。通常，我们可以预期界面处会发生一些晶格失配，它们将作为硅衬底位错线即悬键的一种“栅网”(Crossgrid)存储下来，有些失配，将在二氧化硅膜中作为应变存储下来。

提供给界面必要“自由空间”的另外两种形式，示于图1.3的中部和下部。两者都以二氧化硅层和硅层内的点缺陷为基础。中部的反应是由硅衬底空位(Si_v)提供反应位置，即必要的“自由空间”；下部的反应是硅原子从正常晶格点阵位置移出，产生填隙硅原子(Si_i)和为二氧化硅生长提供所需的反应空间。应当指出，这里给出的各个氧化反应，忽略了点缺陷的可能电荷态。众所周知，除了中性空位外，硅空位至少还有三种电荷态： Si_v^+ 、 Si_v^- 和 Si_v^{2-} 。但是，目前人们对可能的填隙 Si_i 的电荷态知道得很少。

我们相信，这三种机制在氧化过程中都起作用。每一种都可能在特定的工艺条件下处于支配地位。例如，在高浓掺杂 N^+ 硅衬底情况下，费米能级的位置接近导带，空位的平衡浓度极大地增加时，硅空位(Si_v)参与的反应起决定性作用。这机制是解释 N^+ 衬底氧化速率加快定性模型的基础^[1.7, 1.8]。

图1.3下部的反应机理是多布森(Dobson)提出的^[1.30, 1.31]。热氧化期间产生的过剩填隙流，可能是引起杂质氧化增强扩散的根源^[1.30, 1.31]。此外，氧化反应产生的填隙同氧化堆垛层错相关^[1.32, 1.34]。因此由这可以推断，某些过量填隙原子可能移入二氧化硅层。这种填隙流很可能同观测到的氧化层固定电荷 N_f 密切相关。这 N_f 按照氧化不完全的硅原子讨论过了^[1.35]。填隙 Si_i 在二氧化硅层中怎样被消耗的原子级模型正在形成，后面详细讨论^[1.22]。

工艺中点缺陷这个基本概念成功地用于定量模拟整个掺杂范围内的增强氧化效应^[1.7, 1.8]和氧化诱导堆垛层错生长与回退^[1.32, 1.34]，用于定性解释热氧化过程中扩散系

数增大和氧化物固定电荷与工艺参数的关系^[1.20]。图1.4示出了这类模拟的实际内

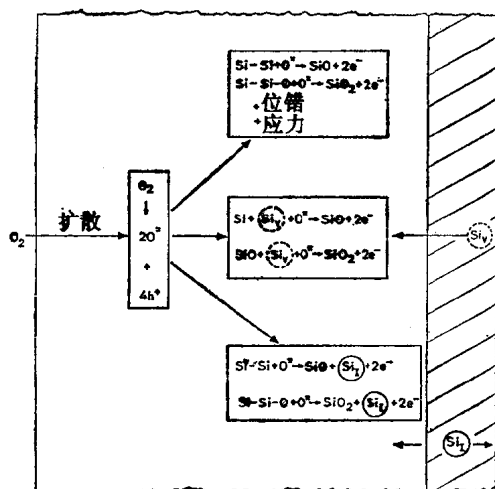


图1.3 界面氧化反应的详细模型，模型中包括 $Si + O_2 \rightarrow SiO_2$ 反应连续不断进行而需要的自由空间的各种可能来源

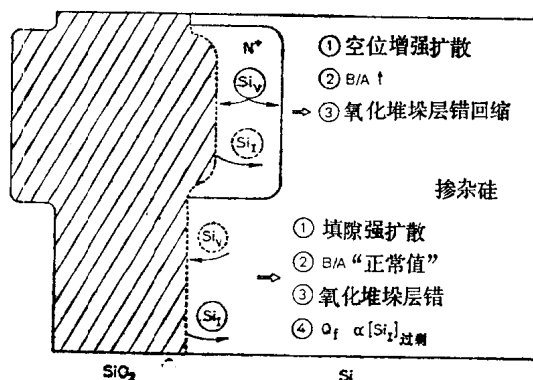


图1.4 热氧化期间，填隙产生和空位消耗的定性效应

容。这样,这个模型对精确模拟和确切理解硅集成电路各工序,将起重要作用。据认为,随着超大规模集成电路结构亚微米化,若想对其进行确切的模拟,非做这类点缺陷模拟不可。这个模型较全面讨论及其有关事项载于我们的过去两年年度报告中^[1.20,1.21]。有兴趣的读者也可参考一些近期综述文章^[1.36-1.38]。

热氧化研究的最后一个方面,就是试验确定硅氧化中起作用的扩散粒子的类型。尽管各个实验室对这个问题做了二十多年的研究,但基本问题仍没有解决。我们感到,这个问题的解决,对于氧化工艺特别是异常的薄层氧化的物理模拟,是非常重要的。我们的实验方法包括氧化时施加电场与引入荷电的粒子群(通过电晕放电),最近还使用了紫外线。

迪尔和格罗夫的早期工作^[1.3]指出,气相氧(O_2)进入二氧化硅(SiO_2),并沿浓度梯度扩散到 SiO_2/Si 界面,在这里硅变为二氧化硅。其后,乔根森的论文^[1.24]指出,当电场加到硅和正在生长的氧化物之间时,如果给硅施加一个和二氧化硅相应的正电位,则氧化反应的速率加快;若电场极性相反,速率也将减小。事实上,足够大的负电位加到硅上时,氧化速率可减到零。这表明,氧化反应同氧负离子相关。这项工作在相当长的时间受到了激烈的指责,说它只是构成一个电化学电池并没有表明二氧化硅自然产生氧离子。然而,米尔斯(Mills)和克罗格(Kroger)在二氧化硅高温电导方面的研究^[1.27]进一步提出,带两个负电荷的氧填隙离子是这种高温条件下起主导作用的带电粒子。

氧离子是中性的,还是电离的争论持续了将近二十年,任何一方都没有确切的证据。不仅干氧化,而且湿氧化也存在这个问题。目前我们仍然不知道氧化时出现的氧粒子群类型及其相对比例。

虽然我们当前这些实验有助于搞清这一问题,但是目前还不能明确确定氧化物中氧粒子群的类型,而是通过电晕放电将电荷加到二氧化硅/气体界面,即表面,来提高氧化速率 V ,以求增强氧或其它氧负离子向 Si/SiO_2 界面输运。

此外,有人提出,若同双原子氧相比占主要部分的单原子氧在二氧化硅/气体表面处,能够以气相形式增加,则氧化反应的速率可以通过提高二氧化硅中的氧原子粒子浓度办法来加快。若距离接地硅基片约一厘米处的针形电极上加负电压,则一个大气压下纯净氧气中进行的初步实验证明,900°C时氧化速率 V 大大增加(近似等于正常速率的三倍)。在针尖下,氧化层厚度增加最多,在离针尖正下方一厘米以外的区域,厚度很快衰减,而在无电场区域厚度达到正常值。实验中不仅负电荷可能沉积到表面,而且某些氧原子也可能离解为氧离子。暴露时间无论长短,氧化速率都要加快,以至于线性和抛物线性动力学系数都变大。近来,这种实验设备已经在更清洁,重复性更好的环境中建立;各种新实验正在进行,预定年内完成。

1.2 离子注入

SUPREM程序目前的版本(第Ⅱ版)实质上利用查表法计算射程分布的。随着器件尺寸的减小,这种方法的局限性越来越明显,特别是许多新器件结构采用了穿过掩蔽层的离子注入。这类多层结构,除了使射程分布计算变复杂以外,还引入了一些其它效

应,比如可能从掩蔽层碰撞出离子。我们首先回顾离子注入杂质分布的SUPREM I 程序计算方法。然后介绍运用玻尔兹曼输运模型研究出的一种新方法。这种新方法将编入 SUPREM II。它具有更广泛更全面的工艺模拟能力。

硅中或二氧化硅中离子注入杂质分布的最简单的描述,是一条对称的高斯曲线。这曲线有两个一阶矩* (first two moments), 投影射程 R_p 和标准差 σ_p , 是由 LSS 理论^[1.39] 计算的。但是,很多离子的实验分布,例如硼或砷,是非对称的。这些注入杂质的分布用简单的高斯曲线来近似,常常是不合适的,以致必须用更高阶矩 (higher order moments) 来构成射程分布。吉本斯 (Gibbons) 和迈尔罗伊 (Myroie)^[1.40] 指出,当非对称性不过分时 (小于标准差), 第三个表征值能提供足够充分的数据来构造精确的分布。这些场合如图1.5所示, 杂质分布可以用不同标准差 σ_1 和 σ_2 的两个半高斯分布曲线来表示。这两个高斯分布曲线在同一个典型射程 R_m 处合拢。这种方法能够用于磷、砷类杂质的分布。但是,对于硼,修正的泊松 IV 型分布^[1.1] 更加确切。对于组合的半高斯分布,其两边由下式给定

$$C_1(y) = P \exp[-(y - R_m)^2 / 2\sigma_1^2] \quad 0 \leq y \leq R_m \quad (1.11)$$

$$C_2(y) = P \exp[-(y - R_m)^2 / 2\sigma_2^2] \quad R_m < y \leq \infty$$

这些参数由查表法和内插法确定^[1.40, 1.41]。

霍夫克 (Hofker) 等人^[1.42] 指出,退火前无定形硅的硼离子注入分布,可以用泊松 IV 分布来描述。他们实验确定了第四个表征值。虽然泊松 IV 型分布很好地描述了从表面到杂质分布峰值之后某一距离处硼的分布,但图 1.6 指出,这种近似不能模拟观察到的因硼离子沿沟道方向**的随机散射造成的指数形尾部。基于一些实验结果^[1.43-1.45], 实验修

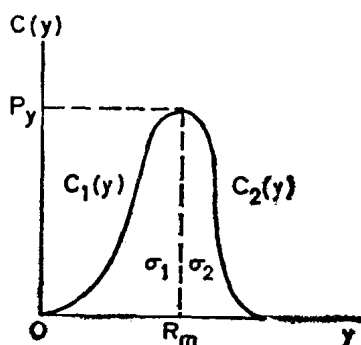


图1.5 离子注入时杂质分布的组合半高斯分布图

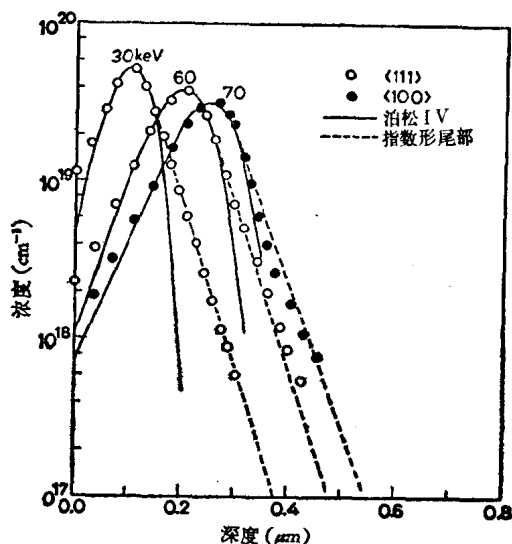


图1.6 用泊松 IV 和改进泊松 IV 分布表示向<111>和<100>硅片随机注入的硼分布。注入剂量为 10^{13} 厘米⁻²

- * 统计函数中, 变量 x 的 n 次方的数学期望 $E[x^n]$ 为 n 阶矩。确切地说 R_p 是一阶矩, σ_p 是标准差而不是矩, 然而这些统称表征值。——译者注
- ** 沟道方向, 指离子轰击晶体时所出现的相对无阻碍穿入的方向, 即同注入方向平行的晶向。——译者注。