

Analysis of B and As diffusion from polycrystalline Si toward monocrystalline Si during rapid heat procedure

This article has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text article.

1991 J. Phys.: Condens. Matter 3 3091

(<http://iopscience.iop.org/0953-8984/3/18/004>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 171.66.16.147

The article was downloaded on 11/05/2010 at 12:05

Please note that [terms and conditions apply](#).

Analyse des diffusions du bore et de l'arsenic du silicium polycristallin vers le silicium monocristallin lors de procédés thermiques rapides

C Gontrand, C Dubois and A Laugier

Laboratoire de Physique de la Matière, Université Associée au CNRS 358, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 20 avenue A Einstein, F-69621 Villeurbanne Cédex, France

Reçu le 2 août 1990, présentation définitive le 23 janvier 1991

Résumé. Nous étudions dans cet article la redistribution des dopants bore et arsenic soumis à des recuits rapides isothermes (RRI) à partir de leur implantation dans une couche de polysilicium déposée sur du silicium monocristallin. Les résultats expérimentaux obtenus par spectroscopie de masse en ions secondaires (SIMS), donnant la diffusion et la codiffusion de ces dopants, sont confrontés à une modélisation. Ceci permet d'ajuster les paramètres utilisés dans les simulations numériques, dont nous montrons les limitations du modèle.

Abstract. In this paper we study the dopant redistribution of boron and arsenic during rapid thermal annealings (RTA) from implantation-doped polycrystalline silicon films into single-crystal silicon. Experimental results provided by secondary-ion mass spectroscopy (SIMS), which give the diffusion and codiffusion of the dopants, are compared with a process modelling. We then fit technological parameters obtained from simulation and show the limitations of the model.

1. Introduction

Les sources de diffusion en polysilicium (Si-poly) sont à l'heure actuelle un élément majeur de la technologie des circuits intégrés à très grande échelle. Le silicium polycircuits MOS (metal-oxide-semiconductor), des contacts entérés, mais aussi des électrodes de grilles ainsi que les contacts émetteurs des transistors bipolaires de haute performance [1], accroissant dans ce cas leur efficacité d'injection. La conjonction de ces deux derniers procédés a permis en outre de réaliser des composants BiCMOS (bipolar and complementary MOS) à partir de la fabrication d'un émetteur de transistor bipolaire autoaligné compatible avec une technologie CMOS [2]; l'étude ci-dessous est réalisée dans ce cadre. Les recuits rapides isothermes (RRI) appliqués à de telles structures permettent d'obtenir des jonctions très fines ainsi qu'une grande activation électrique des dopants.

Expérience: préparation des dopants et caractérisation

Notre lot de plaquettes est constitué par du silicium $\langle 100 \rangle$ dopé au phosphore, de résistivité 0.5 Ω cm. Ces substrats subissent alors une desoxydation et un nettoyage de

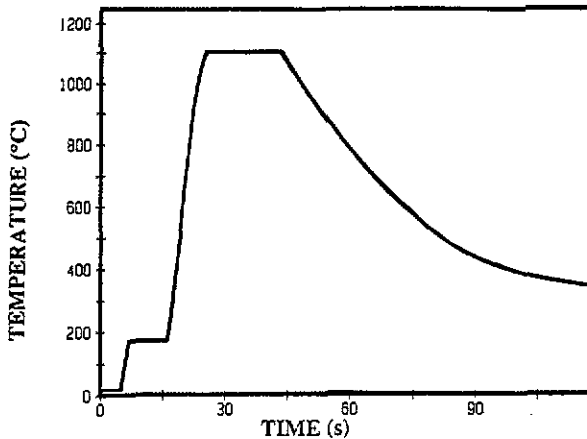


Figure 1. Cycle type de la température en fonction du temps pour un recuit thermique rapide.

Figure 1. Typical time-temperature rapid thermal annealing cycle.

type RCA (1: $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}_2$; 2: HNO_3 ; 3: $\text{HCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}_2$; 4: rinçage: H_2O_2). Immédiatement après les plaquettes sont introduites dans le réacteur de dépôt de polysilicium. Le silicium polycristallin est formé par déposition de vapeur chimique, produite à partir de silane à basse pression (low pressure chemical vapor deposition, LPCVD), 0.6 Torr, à une température de 620 °C. L'épaisseur d'oxyde entre les deux couches de silicium est de 1.5 à 2 nm [3]. La couche de Si-poly a quant à elle une épaisseur de 3800 nm. Les plaquettes sont ensuite implantées soit par de l'arsenic, soit par du bore, ou bien les deux, l'arsenic étant alors implanté le premier. Les doses et les énergies sont respectivement 10^{16} cm^{-2} , 100 keV pour As et $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 30 keV pour B. Ces implantations ont lieu en fait essentiellement dans le silicium polycristallin. Le bore est destiné ici à la création de la base extrinsèque. L'implantation de la base intrinsèque n'a donc pas été réalisée. Finalement nous réalisons les recuits rapides dont un profil type de température en fonction du temps est représenté sur la figure 1; dans le cas de cette étude, la durée du palier thermique est de 20 s. Les mesures de profils en profondeur avant et après recuit ont été réalisées par Spectroscopie de masse en ions secondaires (secondary-ion mass spectroscopy, SIMS); l'appareillage utilisé est un Cameca IMS-3f. Le faisceau d'ions primaire est constitué de césium. Dans le cas de l'arsenic on utilise un filtre en énergie permettant de différencier l'ion As^+ de l'ion moléculaire Si_2OH^+ .

2. Modélisation et simulation

Nous avons utilisé le logiciel TITAN pour simuler les procédés de diffusion décrits ci-dessus. C'est un simulateur bidimensionnel de procédés de fabrication d'un ou plusieurs composants intégrables à très grande échelle, reposant sur la méthode des éléments finis [4, 5]. Il utilise en particulier le modèle de Fair et Tsai [6] pour l'expression du coefficient de diffusion:

$$D = D_0 h(1 + \beta f)/(1 + \beta) \quad (1)$$

avec

$$h = 1 + (C/2n_i)[C/2n_i]^2 + 1]^{-1/2} \quad (2)$$

$$f = C/n_i \quad (3)$$

D_i et n_i designant respectivement la diffusivité et la concentration intrinsèque. C est équivalent à la concentration en électrons (n) pour l'arsenic ou à la concentration en trous (p) pour le bore, dans la mesure où toutes les impuretés sont ionisées. On voit que dans le cas de fortes concentrations, i.e. $C \gg n_i$, h , le facteur d'exaltation dû au champ électrique tend vers 2. Pour le bore les paramètres usuels utilisés lors de recuits classiques, i.e. plusieurs dizaines de minutes, voire plusieurs heures, dans le silicium monocristallin, sont [5]:

$$D_0 = 0.5554 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \quad E_0 = 3.426 \text{ eV} \quad \beta = 19.$$

Pour l'arsenic, ils deviennent [5]:

$$D_0 = 22.83 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \quad E_0 = 4.1 \text{ eV} \quad \beta = 100.$$

Le coefficient de diffusion intrinsèque a la forme générale suivante [6]:

$$D_i = D_0 \exp(-E_0/kT).$$

Quant à la codiffusion de l'arsenic et du bore, elle est en particulier très importante à étudier dans les technologies de fabrication des transistors NPN, où la diffusion de l'émetteur (arsenic), fortement dopé, modifie la diffusion du bore en phase terminale du procédé de fabrication. De plus, la diffusion de la base extrinsèque, dans notre cas, influence elle-même celle d'arsenic.

Nous avons alors affaire à deux équations couplées [7]:

$$\partial C_B / \partial t = D_{i,B} [(1 + \beta_B/f)/(1 + \beta_B)] [h_B \partial C_B / \partial x - (h_B - 1) \partial C_{As} / \partial x] \quad (4)$$

$$\partial C_{As} / \partial t = D_{i,As} [(1 + \beta_{As}f)/(1 + \beta_{As})] [h_{As} \partial C_{As} / \partial x - (h_{As} - 1) \partial C_B / \partial x] \quad (5)$$

avec

$$h = (C/2n_i) + \{[(C_{As} - C_B)/2n_i]^2 + 1\}^{-1/2} \quad (6)$$

C désignant la concentration relative soit au bore soit à l'arsenic, selon que l'on considère l'équation (4) ou (5), et

$$f = [(C_{As} - C_B)/2n_i] + \{[(C_{As} - C_B)/2n_i]^2 + 1\}^{1/2}. \quad (7)$$

3. Résultats et discussion

Nous présentons sur la figure 2 les profils de dopage expérimentaux et simulés d'arsenic mesurés à la sonde ionique avant recuit et aux températures de 1050 °C et 1100 °C, sur lesquels nous avons superposé les résultats des simulations. Les profondeurs des jonctions, définies pour une concentration de 10^{17} cm^{-3} , sont, respectivement, de 0.5 μm et 0.52 μm pour 1050 °C et 1100 °C. La concentration est constante dans le polysilicium, ce qui signifie une importante diffusivité. Les dopants diffusent vers les joints de grains. Lors de la croissance des grains les joints se déplacent et captent des dopants. Pour obtenir le meilleur accord possible entre théorie et expérience nous avons été amené à multiplier par 4000 le préfacteur $D_{0,As}$ dans le polysilicium par rapport au silicium monocristallin, alors que par exemple SUPREM III utilise un rapport par défaut

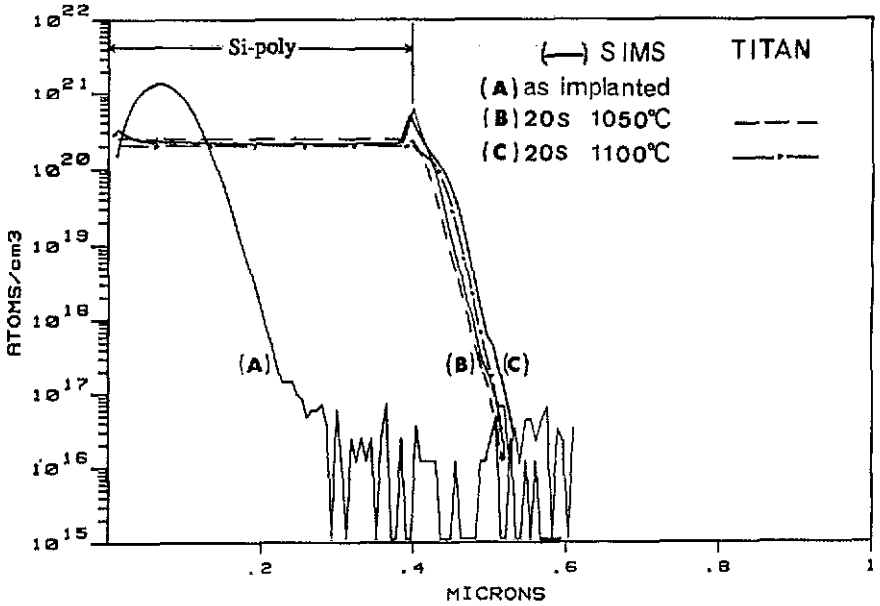


Figure 2. Profils d'arsenic: 1×10^{16} at. cm^{-2} , 100 keV. Mesures SIMS: trait plein. Simulation: RRI (20 s): 1050 °C: tirets, 1100 °C: tirets et points.

Figure 2. Arsenic profiles: 10^{16} at. cm^{-2} , 100 keV. SIMS measurements: full curve. Simulation: RTA (20 s): 1050 °C: broken curve, 1100 °C: chain curve.

$D_{0, \text{As, poly}}/D_{0, \text{As, mono}}$ de 100 [8]. Outre que la diffusion dans le polysilicium dépend de la taille des grains, donc de la température, elle est tributaire de son procédé de dépôt. Ce rapport est à comparer à celui de recuits classiques, par exemple Swaminathan *et al* [9] le fixe à quatre ordres de grandeur supérieur à celui du silicium monocristallin à faible concentration. Quant à la diffusion de l'arsenic dans le silicium monocristallin, nous avons légèrement modifié le préfacteur du coefficient de diffusion des recuits longs [5] en le portant à une valeur de $32 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. La présence d'un pic interfacial entre polysilicium et monosilicium de l'arsenic est ici tout à fait remarquable. Si celui-ci décroît légèrement en fonction de la température, il faut cependant tenir compte de la résolution en profondeur du SIMS, et en particulier de la vitesse d'érosion. Cependant nous sommes attachés à tester la réalité de ce pic ou un possible artefact inhérent au protocole de la manipulation. Pour cela nous avons remplacé le césium du faisceau primaire par de l'oxygène pour corriger la possible exaltation de l'ionisation à l'interface, là où le SIMS révèle la présence de silice; les hauteurs du pic restent inchangées pour les deux températures.

Nous n'avons en fin de compte pas touché aux énergies d'activation usuelles [5], si ce n'est quelques essais, pour ne pas faire intervenir un paramètre supplémentaire difficile à contrôler, dans la mesure où l'ajustement des préfacteurs des diffusivités donnent des résultats satisfaisants. Cependant on doit avoir à l'esprit que l'énergie d'activation aux grains de joints des métaux est à mi-valeur de celle de la diffusion dans le volume. Qui plus est un manque de données supplémentaires, pouvant permettre des synthèses, et en particulier l'influence de l'état de l'interface Si-poly/Si-mono nous incline à la prudence.

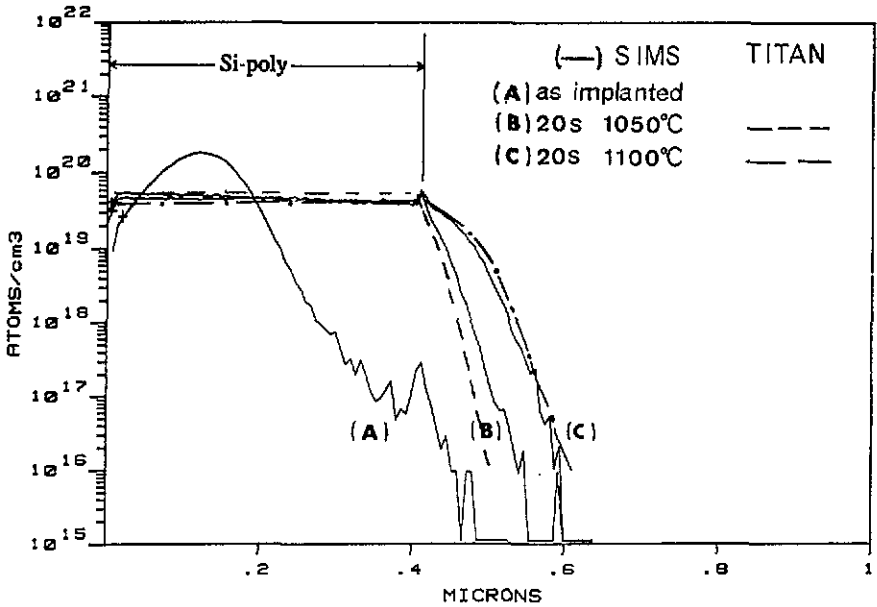


Figure 3. Profils de bore: 2×10^{15} at. cm^{-2} , 30 keV. Mesures SIMS: trait plein. Simulation: RRI (20 s): 1050 °C: tirets, 1100 °C: tirets et points.

Figure 3. Boron profiles: 2×10^{15} at. cm^{-2} , 30 keV. SIMS measurements: full curve. Simulation: RTA (20 s): 1050 °C: Broken curve, 1100 °C: chain curve.

Finalement, si TITAN modélise avec un bon accord la redistribution de l'arsenic, le pic à l'interface n'est pas pris en compte.

Les profils de bore sont quant à eux représentés sur la figure 3. Les profondeurs des jonctions, définies comme dans le cas de l'arsenic, sont respectivement de $0.5 \mu\text{m}$ et $0.56 \mu\text{m}$ pour 1050 °C et 1100 °C. Dans le silicium polycristallin, le coefficient de diffusion doit être assez fort pour obtenir une distribution quasi-uniforme du dopant, typiquement $D_{0,B} = 60 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Par contre dans le monosilicium, nous l'avons porté à $2.6 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$; ce résultat est à corrélérer à l'interprétation donnée par Fair [10, 11] et autres [12] de la forte diffusivité due à une zone de dislocations riche en défauts dont la resorption ayant lieu en quelques secondes ne peut pas être considérée comme un transitoire lors de recuits rapides. Le meilleur lissage, bien que moins bon à 1050 °C qu'à 1100 °C, est réalisé pour un β , facteur qui contrôle la dépendance des diffusivités vis à vis des concentrations, égal à cinq. De même que pour l'arsenic nous avons réutilisé de l'oxygène pour l'érosion ionique.

Les pics à l'interface S-poly/Si-mono de la figure 4 disparaissent, sans altération des autres parties des courbes.

L'inhomogénéité de la diffusion dans le polysilicium est d'importance. Les grains croissent très tôt lors du recuit, dans la seconde. Cette évolution paraît être la cause principale du transfert des dopants dans les joints. La taille des grains étant ensuite figée, un processus de diffusion nouveau interviendra. La codiffusion des deux dopants est représentée sur la figure 4 toujours à 1050 °C et 1100 °C, ainsi que les profils d'implantation.

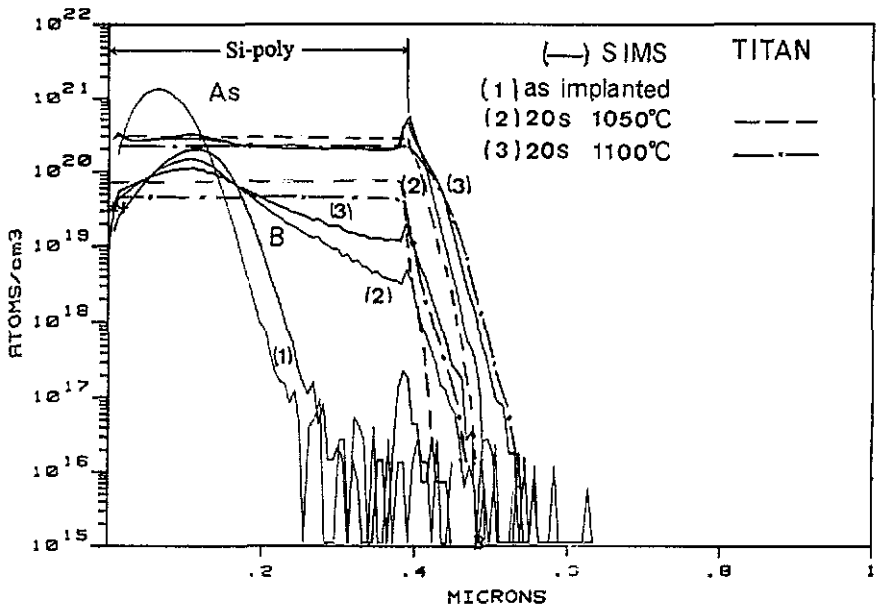


Figure 4. Bore (2×10^{15} at. cm^{-2} , 30 keV) en codiffusion avec l'arsenic (1×10^{16} at. cm^{-2} , 100 keV). Données SIMS: trait plein. Calcul: RRI (20 s): 1050 °C: tirets, 1100 °C: tirets et points.

Figure 4. Boron (2×10^{15} at. cm^{-2} , 30 keV) in codiffusion with arsenic (1×10^{16} at. cm^{-2} , 100 keV). SIMS data: full curve. Calculation: 1050 °C: broken curve, 1100 °C: chain curve.

Là aussi, soulignons qu'un autre avantage du polysilicium dans la configuration de transistor bipolaire comme source de diffusion est d'obtenir des profils de bore raides, donnant des régions de base très étroites et très dopées. Au niveau de notre travail on observe que la base extrinsèque de bore est bien sûr en deça de la diffusion d'émetteur d'arsenic. Les profondeurs de jonctions sont ici de $0.48 \mu\text{m}$ et $0.5 \mu\text{m}$ pour As, et de $0.44 \mu\text{m}$ et $0.46 \mu\text{m}$ pour B, aux températures respectives de 1050°C et 1100°C , par rapport aux diffusions simples l'arsenic à reculé de 20 nm, alors que celle de bore a diminué de 60 nm à 100 nm, respectivement, à ces températures. Il y a rétention mutuelle des dopants: en particulier la concentration d'arsenic freine le bore dans la région polysilicium. Si nous avons pu garder les diffusivités fixées ci-dessus dans le cas des unidiffusions dans le monosilicium, par contre il est difficile d'appréhender globalement les profils des dopants dans le polysilicium cristallin, ne pouvant n'y réaliser le lissage que par morceaux. Ceci doit donc incliner à la prise en compte du caractère bidimensionnel du silicium polycristallin, en l'occurrence de la diffusion latérale moins rapide que dans la direction de l'interface.

Nous faisons remarquer que nous n'avons pas lissé les courbes expérimentales; ceci permet en particulier d'apprécier la résolution expérimentale pour chaque dopant, à savoir entre 10^{16} et 10^{17} pour l'arsenic et 10^{15} et 10^{16} pour le bore.

Finalement nous voulons lever une interrogation ponctuelle quant aux courbes SIMS; la dose ne paraît pas être conservée, alors que nous l'avons supposée lors du dépouillement, en particulier pour les implantations de bore en simple diffusion (figure 3) et en codiffusion (figure 4) ainsi que pour l'arsenic à 1050°C et 1100°C (figure 4).

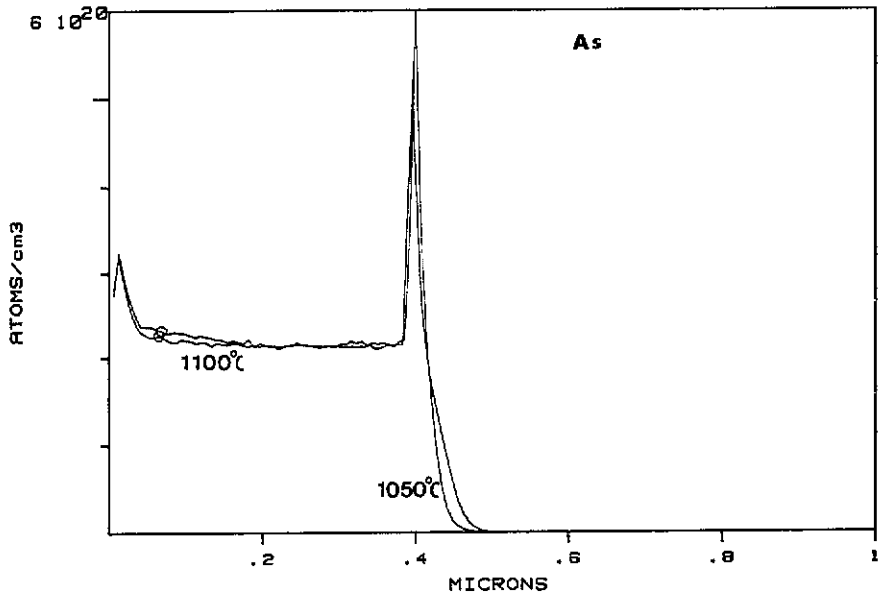


Figure 5. Comparison des doses pour l'arsenic, à 1050 °C et 1100 °C.

Figure 5. Comparison of doses for arsenic, at 1050 °C and 1100 °C.

4. Conclusion

Dans ce travail nous avons caractérisé et modélisé avec un accord satisfaisant des structures Si-poly sur Si-mono quant à la diffusion du bore et de l'arsenic, ainsi que de la codiffusion de ces deux dopants, dans le but de réaliser des émetteur et base extrinsèque de transistors haute performance.

Cependant l'état de l'interface Si-poly/Si-mono est mal pris en compte. Il a été montré [13] que les traitements RCA suivis de gravure HF ne permettent pas d'avoir des interfaces totalement propres et d'obtenir une bonne reproductibilité. En outre le bore et l'arsenic peuvent changer de phase à l'interface lors de recuits, formant des borures ou des arséniures, ce qui induit donc un changement de type de ségrégation, durant l'altération de la silice de l'interface initiale. Doit-on être amené à utiliser des technologies plus complexes, pour améliorer le procédé, comme des nettoyages et des oxydations élaborés sous ultra-vide, tout en chauffant pour permettre à la surface endommagée de silicium monocristallin de se restructurer par croissance (cf MBE), et que les gaz piégés s'évaporent, tel que SiO provenant de la réaction entre Si et SiO₂? La aussi, dans ce cas de figure, tous les phénomènes physiques ne sont pas pris en compte, en particulier celui de l'interface Si-poly/Si-mono, dans la mesure où le réalignement épitaxial du polysilicium n'est modélisé ni par le simulateur TITAN ni par SUPREM III. Par contre dans le cadre de la VLSI, c'est les procédés de type RCA uniquement qui paraissent idoines. C'est ce qui a été choisi ici pour éviter un important réalignement épitaxial et assurer la reproductibilité du nettoyage à l'interface. La couche interfaciale SiO₂ présente une barrière à l'injection des trous minoritaires du transistor bipolaire, d'où la possibilité d'obtenir un accroissement des gains de ce type de composants. Ryssel *et al* [14] ont montré que le gain en courant est plus élevé si l'on ne grave pas avant dépôt CVD, et c'est cet amoncellement d'arsenic à l'interface qui en est la cause principale.

Dans ce cas les diffusions dans les différents matériaux de la structure peuvent être correctement modélisés. Néanmoins, dans le cadre de cette étude, les modélisations à l'aide de TITAN utilisé ici ne permettent pas de considérer la présence du pic de concentration d'arsenic à l'interface. O'Neill *et al* [15] l'ont cependant modélisé en considérant en particulier l'interface comme un joint de grain.

La continuité de ce travail consistera en une meilleure compréhension de la morphologie de la couche interfaciale Si-mono/Si-poly, pour en prédire son influence vis à vis de la ségrégation des dopants et de leur diffusion. Pour cela nous utiliserons divers types de traitements précédant le dépôt CVD du polysilicium.

Remerciements

Les plaquettes de silicium ont été fournies par le CNET-CNS de Meylan, sous la responsabilité de Mr A Nouailhat, dans le cadre d'un accord tripartite CNRS/INSA de Lyon/CNET. Le logiciel TITAN, marque déposée du CNET, est implanté au Centre Inter-universitaire de Microélectronique de la Région Lyonnaise (CIMIRLY), à l'INSA.

Bibliographie

- [1] Ning T et Isaac R 1980 *IEEE Trans. Electron Devices* **27** 112051
- [2] Giroult G, Nouailhat A et Gauneau M 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 515
- [3] Josquin W J M, Boudewijn P R et Tamminga Y 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 960
- [4] Gerodolle A, Giroult G, Martin S et Nouailhat A 1988 *Proc. 18th Eur. Solid State Devices Res. Conf. (ESSDERC 88) (Montpellier, 1988)*; *J. Physique Coll. Suppl.* **9** C4 93-6
- [5] Gerodolle A et Martin S *TITAN Simulation Bidimensionnelle des Procédés de Fabrication des Circuits Intégrés* CNET-CNS Meylan note technique
- [6] Fair R B et Tsai J C C 1975 *J. Electrochem. Soc.* **122** 1689
- [7] Hu S M et Schmidt S 1968 *J. Appl. Phys.* **39** 4272
- [8] Ho C P et Hansen S E 1983 *Stanford University Technical Report No SEL 83-001*
- [9] Swaminathan B, Saraswat K C, Dutton R W et Kamins T I 1982 *Appl. Phys. Lett.* **40** 795
- [10] Fair R B, Wortman J J et Liu J 1984 *J. Electrochem. Soc.* **131** 2387
- [11] Fair R B M 1986 *J. Vac. Sci. Technol.* **A4** 926
- [12] Probst V, Böhm H J, Schabert H, Oppolser H et Weitzel I 1988 *J. Electrochem. Soc.* **135** 671
- [13] Murarka S P et Williams D S 1987 *J. Vac. Sci. Technol.* **B** **5** 1674
- [14] Ryssel H, Iberl H, Prinke G, Habberger H et Kranz H 1981 *J. Appl. Phys.* **24** 197
- [15] O'Neill A G, Hill C, King J et Please C 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 167