

VARIATION DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION ET D'ACTIVATION DU BORE DANS DES FILMS DE POLYSILICIUM SOUS L'EFFET DE LA SEGREGATION ET DU PIEGEAGE

Reçu le 12/01/2003 – Accepté le 11/05/2003

Résumé

Ce travail s'intéresse à la modélisation de la diffusion du bore introduit par implantation ionique à forte dose dans des dépôts de silicium polycristallin obtenus par LPCVD. Il est en effet primordial de contrôler la redistribution de l'impureté dopante dans ces films minces pour leur utilisation comme grille en technologie CMOS standard. Durant les recuits thermiques post-implantation, le bore diffuse dans la couche mince en occupant des sites où il peut être électriquement actif. Cependant, le dépassement de la solubilité solide dû au très fort dopage ainsi que les endommagements créés par l'implantation ionique, entraînent l'apparition de divers phénomènes tels que ségrégation, formation d'amas ou clusters et piégeage du dopant. En tenant compte de ces phénomènes, nous proposons une approche théorique, basée sur le modèle classique lacunaire de la diffusion, auquel vont être greffés de nouveaux termes : le facteur de piégeage, le taux de clusters et le pourcentage d'activation du dopant. La simulation de profils SIMS expérimentaux permettra d'étudier la diffusion transitoire accélérée du dopant, ainsi que d'évaluer son taux de piégeage et son pourcentage d'activation.

Mots clés: Modélisation, diffusion, polysilicium, piégeage, ségrégation.

Abstract

This work deals with the boron diffusion modelling into polycrystalline silicon obtained by LPCVD and implanted at high dose. It is essential to control the doping impurity redistribution in those thin films for their applications as gates in standard CMOS technology. During the thermal post-implantation anneals, boron diffuses through the thin layers towards sites where it can be electrically active. However, the solid solubility excess due to the very strong doping and by ion implantation damages, lead to various phenomena such as segregation, clustering, and dopant trapping. Taken these phenomena into account, we propose a theoretical approach, based on the classical vacancy diffusion model, in which new terms will be added : the trapping factor, the clusters rate and the doping activation rates. The experimental SIMS profiles simulation will allow the study of the dopant transient enhanced diffusion, as well as the evaluation of the trapping and activation rates.

Keywords: Modelling, diffusion, polysilicon, trapping, segregation.

F. MANSOUR
S. ABADLI
R. MAHAMDI
Département d'Electronique
Faculté des Sciences
de l'Ingénieur
Université Mentouri
Constantine, Algérie

ملخص

يهتم هذا العمل بنمذجة انتشار ذرات البور المطعمة بطريقة الغرس الأيوني بتركيز مرتفع، في رقائق السليسيوم متعدد البلورات والمتحصل عليها بطريقة الترسيب LPCVD. من المهم مراقبة وتحديد توزيع ذرات التطعيم داخل هذه الرقائق بغرض استعمالها كشبكات في تكنولوجيا المركبات الميكرو إلكترونية CMOS. أثناء المعالجة الحرارية لتنظيم تموقع الذرات بعد الغرس الأيوني، ينتشر البور في هذه الرقائق ويتموضع في محطات أين يمكنه أن يكون نشطا كهربائيا. إن اجتياز قيمة الذوبان الحدية الذي ينتج عن التطعيم المركز، إضافة إلى العيوب الناجمة عن أضرار الغرس الأيوني، يمكن أن من إدخال ظواهر مختلفة كالتقريب، تكوين التكدسات، وحصر ذرات التطعيم. أخذين بعين الاعتبار هذه الظواهر، نقترح حاليا نموذجا نظريا يعتمد على آلية الانتشار الكلاسيكي عن طريق الفراغات، أين يتم إضافة حدود جديدة: معامل الحصر، معامل التكدس ونسبة تنشيط المطعم. إن مطابقة نتائج التمثيل بتلك المحصل عليها بطريقة التحليل الطيفي لكثافة الأيونات الثنائية SIMS، تسمح بدراسة الانتشار الانتقالي السريع للمطعم، إضافة إلى تحديد مستوى التكدس ونسبة التنشيط.

الكلمات المفتاحية: نموذج، انتشار، سليسيوم متعدد البلورات، الحصر، التقريب.

Actuellement, les films minces de silicium polycristallin élaborés par la technique LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) très fortement dopés, trouvent de nombreuses applications dans les technologies de fabrication de composants et de circuits intégrés. Dans beaucoup de ces applications, ces films font l'objet de divers traitements. En particulier, le recuit thermique après implantation ionique a pour but de guérir l'échantillon de ses défauts et de permettre aux ions implantés de prendre des positions substitutionnelles où ils seront électriquement actifs et capables d'échanger des charges avec les atomes du réseau (recuit post-implantation et d'activation). Le très fort dopage des films entraîne un dépassement de la solubilité solide du dopant, et ainsi, la forte dose d'implantation ionique crée des endommagements (défauts interstitiels), ces conditions rendant la simulation théorique différente. Dans cette étude, et toujours dans l'optique de résoudre les problèmes posés par les hauts niveaux de dopage, nous nous intéressons beaucoup plus à modéliser l'épaulement et le rehaussement des profils de dopage après l'étape du traitement thermique.

En se basant sur des modèles de diffusion du bore précédemment étudiés [1,2], qui reposent sur un mécanisme lacunaire lié aux effets des fortes concentrations, nous décrivons à présent un modèle plus détaillé qui tient compte de l'effet de piégeage et de la ségrégation du dopant dans les défauts interstitiels. Ces défauts sont engendrés par les endommagements dus à la forte dose d'implantation ionique

[3,4], à la particularité de la structure constituée de grains et joints de grains [5], ainsi qu'à la précipitation du dopant liée à la solubilité solide limite [6,7].

PROCEDURE EXPERIMENTALE

Les films polycristallins de cette étude ont été obtenus par décomposition chimique en phase vapeur (LPCVD : Low Pressure Chemical Vapor Deposition) du disilane (Si_2H_6) à la température de 465°C . Ces films, déposés à l'état amorphe, sont ensuite dopés au bore par implantation ionique à l'énergie de 15 KeV avec une dose de 4.10^{15} atomes/ cm^2 . Il est donc nécessaire de procéder à des recuits qui conduisent à la fois à la recristallisation des films et à l'activation électrique du dopant, après l'étape d'implantation.

Afin d'éviter des redistributions longues, les recuits thermiques post-implantation ont été effectués à la température de 700°C , pour différentes durées comprises entre 1 et 30 minutes. La répartition du dopant dans ces films est obtenue par spectrométrie de masse des ions secondaires (SIMS : Secondary Ion Mass Spectrometry).

La figure 1 montre le tracé des profils expérimentaux (SIMS) de dopage. Le profil SIMS initial montre l'allure du dopant juste après son implantation dans le film. Ce profil servira de référence ou de condition initiale lors de la simulation. Les autres ont été obtenus après recuit thermique pour différentes durées à une température constante. Ils servent de références durant l'ajustement théorique.

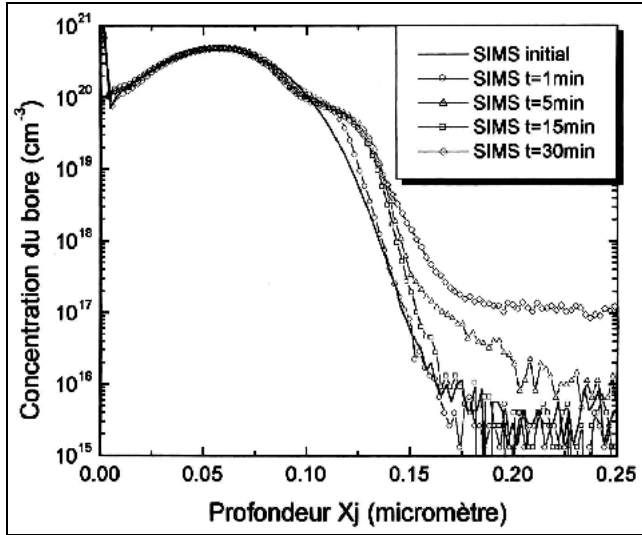


Figure 1: Profils SIMS du bore avant et après recuit (1, 5, 15 et 30 min. à $T=700^\circ\text{C}$).

MODELE DE DIFFUSION

A très fort niveau de dopage, une partie des atomes dopants peut former des amas (clusters) électriquement inactifs et immobiles [4]. En se basant sur des modèles de diffusion du bore précédemment étudiés [1,2], qui reposent sur un mécanisme lacunaire lié aux effets des fortes concentrations, nous décrivons à présent un modèle plus détaillé qui tient compte de l'effet de piégeage et de la

ségrégation du dopant dans les défauts interstitiels. Le mécanisme de diffusion est supposé lacunaire; le transfert des dopants entre sites lacunaires (mécanisme de diffusion) et sites libres interstitiels (mécanisme de piégeage) est donné par les relations suivantes :

$$\text{B}_V^- + \text{I} \rightleftharpoons \text{B}_i^0 \quad (1)$$

$$\text{B}_i^0 + m.\text{I} \rightleftharpoons \text{B}_{\text{Cl}}^0 \quad (2)$$

B_V^- , B_i^0 , I et B_{Cl}^0 sont successivement, le bore lacunaire chargé négativement, le bore interstitiel neutre (piégé), le défaut interstitiel (piège) et le bore neutre sous forme de cluster. L'équation (1) représente l'interaction entre les atomes de bore et les différents défauts interstitiels; l'équation (2) représente la formation des clusters où m est le nombre maximal de sites occupés par cluster.

Le piégeage et la ségrégation du dopant sont fortement liés à la concentration chimique du dopant, à la solubilité solide limite et au nombre maximal de sites libres par cluster m . Le lien entre ces différentes concentrations est donné par [6] :

$$\frac{C}{C_{\text{sol}}} = \frac{C_V}{C_{\text{sol}}} + m \left(\frac{C_V}{C_{\text{sol}}} \right)^{2m} \quad (3)$$

C : la concentration totale du dopant,

C_V : la concentration du dopant lacunaire,

C_{sol} : la concentration de la solubilité solide limite.

Le déplacement des atomes ionisés étant équivalent à une densité de courant, le flux de l'impureté dopante en lui associant les effets des lacunes, des amas et du dépassement de la solubilité solide limite devient :

$$J_B = -D_i \frac{1 + \beta(p/n_i)}{1 + \beta} \left(1 + \frac{\alpha C}{\sqrt{(\alpha C)^2 + 4n_i^2}} \right) S \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4)$$

avec :

$$\frac{p}{n_i} = \frac{2n_i}{(-\alpha C) + \sqrt{(\alpha C)^2 + 4n_i^2}} \quad (5)$$

$$S = \frac{\partial C_V}{\partial C} = \frac{1}{1 + 2m^2 \left(\frac{C_V}{C_{\text{sol}}} \right)^{2m-1}} \quad (6)$$

Le terme $[(1 + \beta(p/n_i)) / (1 + \beta)]$ permet d'inclure la dépendance du coefficient de diffusion effective de la concentration. D_i : la diffusivité intrinsèque, C : la concentration totale du dopant, p : la concentration de trous, n_i : la concentration intrinsèque, α : le degré d'activation électrique du dopant et β : le facteur de dépendance de diffusivité de la concentration des lacunes.

La diffusivité intrinsèque D_i suit une loi d'Arrhénius de la forme :

$$D_i = D_0 \exp\left(\frac{-E_a}{KT}\right) \quad (7)$$

D_0 est le facteur d'ajustement de la diffusivité et E_a l'énergie d'activation du dopant dans le silicium.

Le terme S , représente le facteur de piégeage et de ségrégation. L'équation unidimensionnelle de Fick (en associant les effets des lacunes, du champ électrique interne, du piégeage et de la ségrégation) aura la forme suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_i \frac{1 + \beta(p/n_i)}{1 + \beta} \left(1 + \frac{\alpha C}{\sqrt{(\alpha C)^2 + 4n_i^2}} \right) S \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (8)$$

Le coefficient de diffusion effectif devient fortement dépendant des effets dus aux très forts dopages :

$$D_{eff} = D_i \frac{1 + \beta(p/n_i)}{1 + \beta} \left(1 + \frac{\alpha C}{\sqrt{(\alpha C)^2 + 4n_i^2}} \right) S \quad (9)$$

L'équation de diffusion (8) est une équation aux dérivées partielles. La résolution numérique de ce genre d'équation passe dans la plupart des cas par une discrétisation du domaine de résolution, en tenant en compte des conditions initiales et des conditions aux limites.

RESULTATS ET DISCUSSION

Les profils théoriques ont été calculés à partir d'une résolution numérique de l'équation de diffusion de Fick (8) par la méthode des différences finies, où le facteur de piégeage et de ségrégation S contrôle la diffusivité et l'activation électrique du dopant. Ils seront dépendants de la concentration du bore, du nombre maximal de sites libres par cluster m et de la solubilité solide limite du dopant C_{sol} .

A partir de la forme analytique d'une Gaussienne, définie par les trois moments : la dose d'implantation ionique Q_d , le parcours projeté R_p et la déviation standard projetée ΔR_p connue par la forme [8] :

$$C(x) = \frac{Q_d}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right),$$

nous avons déterminé le profil de redistribution initial (condition initiale). La figure 2 montre la bonne superposition des profils théorique et expérimental.

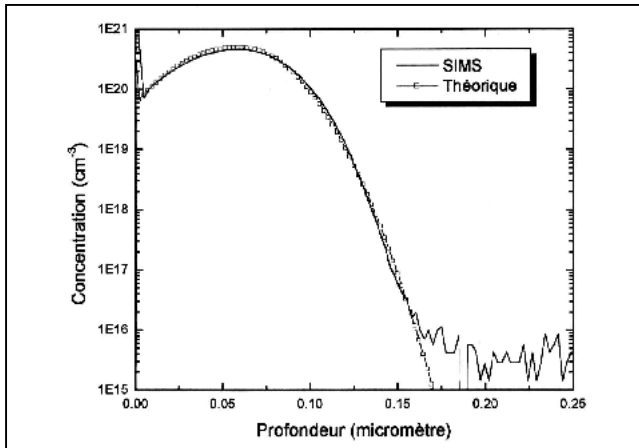


Figure 2: Ajustement des Profils SIMS et théorique avant le recuit thermique.

Les valeurs du coefficient de diffusion, du degré d'activation du dopant et de la taille du cluster ont été calculées au moyen d'un ajustement avec les profils expérimentaux SIMS. Cet ajustement est réalisé en faisant agir quatre paramètres seulement, D_0 , α , β et le nombre maximal de sites libres par cluster m .

Les figures 3, 4, 5 et 6 montrent le tracé des courbes théoriques simulées via notre modèle et leurs ajustements avec les profils SIMS expérimentaux. Comme prévu, les valeurs du coefficient de diffusion sont faibles par rapport à celles données pour des concentrations moins élevées [9,10]. Ces variations en fonction du temps sont indiquées sur la figure 7, où l'on remarque une diminution rapide dans les premières durées de recuit, et presque stable à partir de 15 minutes de recuit. Le degré d'activation électrique du bore α , après ce recuit, est de l'ordre de 65%, ce qui montre que ce traitement thermique permet d'activer le dopant. Le nombre maximal de sites libres par cluster m atteint la valeur $m=4$. Il est supérieur à celui proposé pour le silicium monocristallin [4,7], cela étant justifié par la forte ségrégation et le piégeage important dans les défauts des grains et des joints de grains [11,12]. La figure 8 indique la superposition de profils théoriques obtenus pour différentes valeurs du facteur m . Le meilleur ajustement a été obtenu pour la valeur maximal $m=4$, ce qui confirme bien l'hypothèse de la forte ségrégation et du piégeage du dopant.

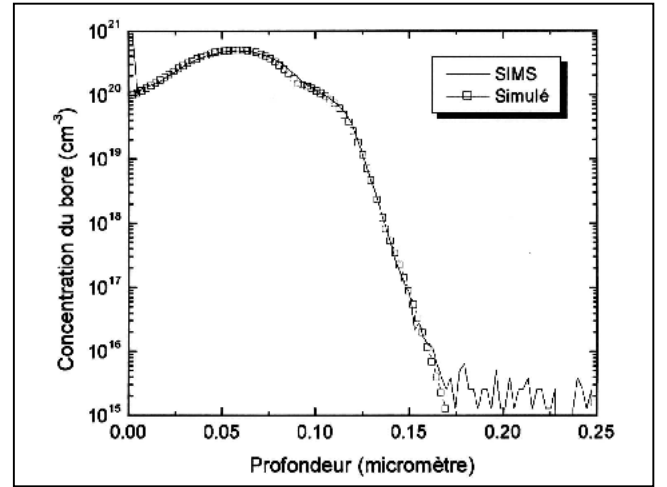


Figure 3: Ajustement des Profils SIMS et simulé après un recuit thermique à 700°C/1min.

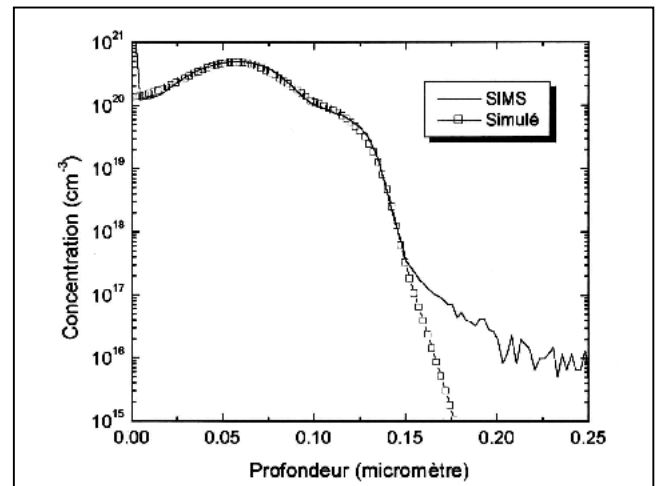


Figure 4: Ajustement des Profils SIMS et simulé après un recuit thermique à 700°C/5min.

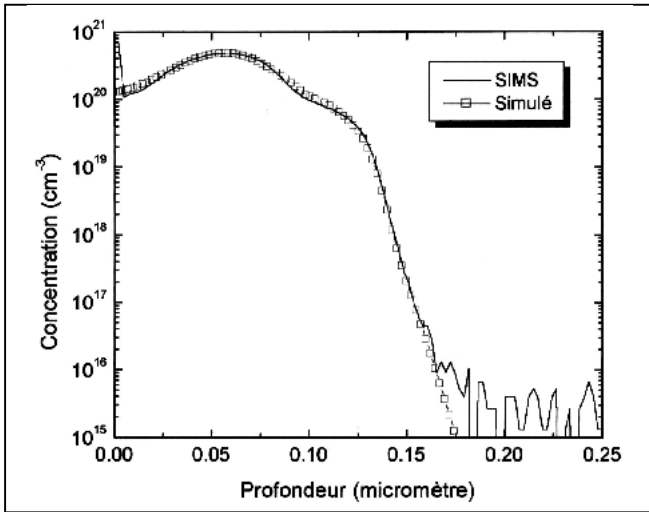


Figure 5: Ajustement des Profils SIMS et simulé après un recuit thermique à 700°C/15min.

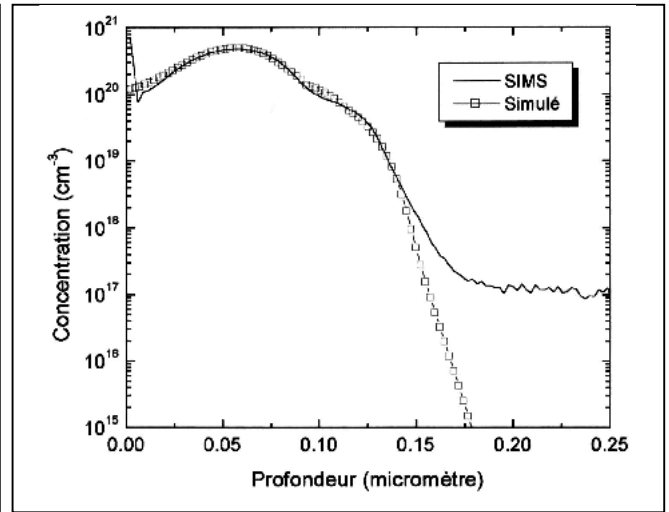


Figure 6: Ajustement des Profils SIMS et simulé après un recuit thermique à 700°C/30min.

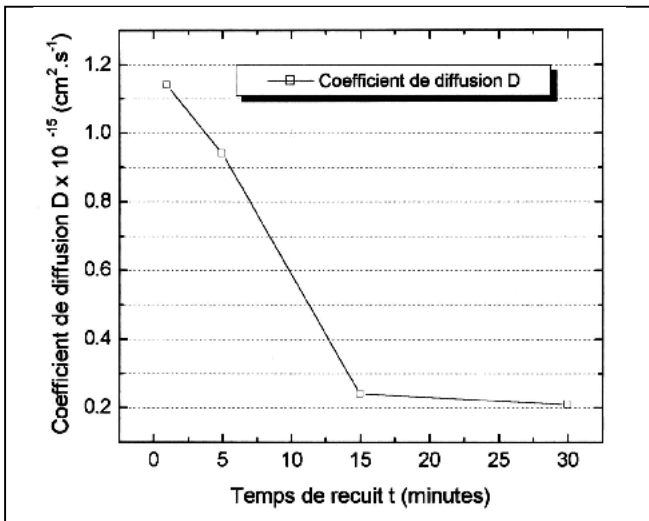


Figure 7: Variation du coefficient de diffusion en fonction de la durée de recuit thermique à 700°C.

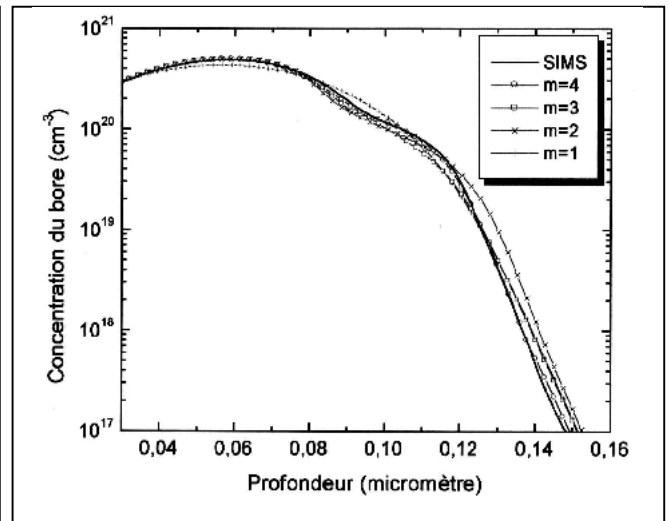


Figure 8: Effet du facteur m sur l'épaule des profils de redistribution du bore.

La formation des clusters par le piégeage et la ségrégation du dopant dans les défauts interstitiels au-dessous de la solubilité solide limite réduit vraisemblablement le coefficient de diffusion et l'activation électrique du dopant sous l'effet du facteur S (Fig. 9 et 10). Ceci rehausse le profil de dopage et augmente la taille des clusters. Les résultats de cette étude sont en bon accord d'une part avec la littérature [4] et, d'autre part, avec les travaux de Mahamdi *et al.* [1] sur la diffusion du bore dans le polysilicium.

CONCLUSION

La superposition des profils expérimentaux *SIMS* et des profils théoriques calculés par notre modèle, a permis la déduction des coefficients de diffusion, du degré d'activation électrique et du nombre maximal de sites libres par cluster pour différentes durées de recuit thermique. Ce modèle théorique tient compte du mécanisme lacunaire en

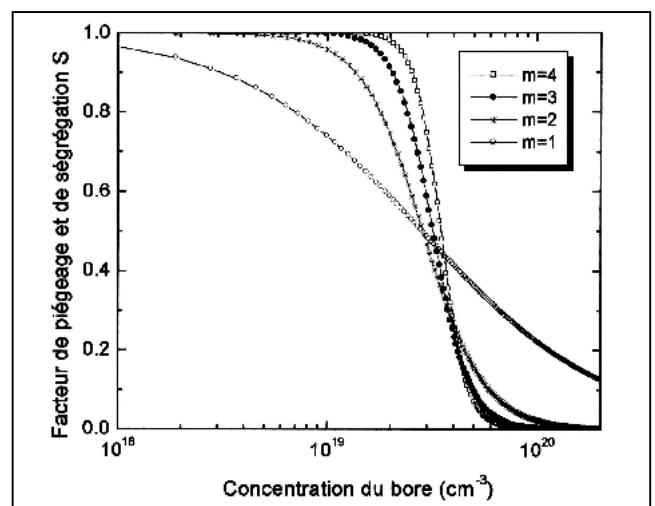


Figure 9: Variation du terme S en fonction de la concentration du dopant.

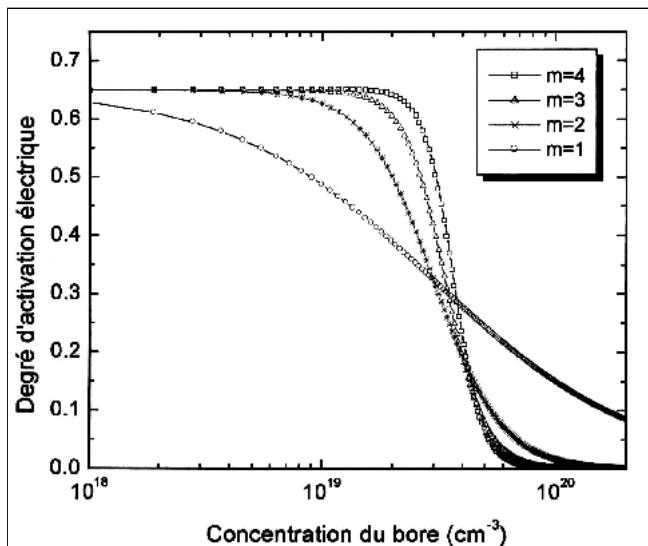


Figure 10: Variation du pourcentage d'activation α en fonction de la concentration du dopant.

lui associant des phénomènes liés aux effets des très forts niveaux de dopage tels que la formation des clusters par le piégeage et la ségrégation du dopant et le dépassement de la solubilité solide limite. Dans ce cas, la diffusivité et l'activation électrique seront dépendants de la concentration du dopant, de la taille du cluster et de la solubilité solide limite. Ce modèle permet de simuler, en particulier, le rehaussement transitoire et l'épaulement des profils qui apparaît à la limite de la solubilité solide du dopant. Il reste applicable pour les faibles et moyennes concentrations.

Cette étude montre qu'à haut niveau de dopage, la solubilité solide limite pourrait être dépassée, et que le surplus de dopant se précipite et forme des amas inactifs et immobiles. La formation des clusters par le piégeage et la ségrégation du dopant dans les défauts interstitiels, au-dessous de la solubilité solide limite, réduit vraisemblablement le coefficient de diffusion et l'activation électrique du dopant, ceci rehaussant le profil de dopage et augmentant la taille des clusters.

REFERENCES

- [1]- Mahamdi R., Mansour F., Scheid E., Boyer P.T. and Jalabert L., "Boron diffusion and activation during heat treatment in heavily doped polysilicon thin films for P⁺ Metal-Oxyde-Semiconductor transistors gates", *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 40, (2001), p. 6723.
- [2]- Rajendran K. and Schoenmaker W., "Modeling of complete suppression of boron out-diffusion in Si_{1-x}Ge_x by carbon incorporation", *Solid-State Electronics*, Vol. 45, (2001), p. 229.
- [3]- Batra S., Manning M., Dennison C., Sultan A., Bhattacharya S., Park K., Banerjee S., Lobo M., Lux G., Kirschbaum C., Noberg J., Smith T. and Mulvaney B., "Discontinuity of B-diffusion profiles at the interface of polycrystalline Si and single crystal Si", *J. Appl. Phys.*, Vol. 73 (8), (1993) p. 3800.
- [4]- Masashi Uematsu, "Simulation of high-concentration boron diffusion in silicon during post-implantation annealing", *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 38, (1999), p. 3433.
- [5]- Sze S.M., *VLSI Technology* (Wiley, New York). 2nd ed., (1988), p. 308.
- [6]- Puchner H. and Selberherr S., "Dynamic grain-growth and static clustering effects on dopant diffusion in polysilicon", *IEEE Tans. Electron Devices*, vol. 46, (1994) p. 109.
- [7]- Masashi Uematsu, "Simulation of clustering and transient enhanced diffusion of boron in silicon", *J. Appl. Phys.*, Vol. 84 (8), (1998), p. 478.
- [8]- Cahn R.W., Haasen P. and Kramer E.J., "Materials Science and Technology" (Electronic structure and properties of semiconductors), Vol. 4, April (1991), p. 254.
- [9]- Huruici S. and Blanchard R., "Boron diffusion in polycrystalline silicon layers", *Solid-State Electronics*, Vol. 18, (1975), p. 529.
- [10]- Giroult G., Nouailhat A. and Gauneau M., "Study of a WSi₂/polycrystalline silicon / monocrystalline silicon structure for a complementary Metal - Oxyde - Semiconductor for a compatible self-aligned bipolar transistor emitter", *J. Appl. Phys.*, Vol. 67, (1990), p. 515.
- [11]- Pelaz L., Jaraiz M., Gilmer G.H., Gossmann H.J., Rafferty C.S., Eaglesham D.J. and Poate J.M., "Boron diffusion and clustering in ion implanted Si : the role of B cluster precursors", *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 70 (17), (1997), p. 2285.
- [12]- Schaber H., Criegern R.V. and Weitzel I., "Analysis of polycrystalline silicon diffusion sources by secondary ion mass spectrometry", *J. Appl. Phys.*, Vol. 58 (11), (1985), p. 4036. □