



Résolution analytique bidimensionnelle de l'équation de diffusion dans le cas des structures silicium-sur-isolant

I. Sweid, N. Guillemot, G. Kamarinos

► To cite this version:

I. Sweid, N. Guillemot, G. Kamarinos. Résolution analytique bidimensionnelle de l'équation de diffusion dans le cas des structures silicium-sur-isolant. *Revue de Physique Appliquée*, 1988, 23 (6), pp.1111-1116. 10.1051/rphysap:019880023060111100 . jpa-00245913

HAL Id: jpa-00245913

<https://hal.science/jpa-00245913>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification

Physics Abstracts

05.60 — 61.70 — 02.60

Résolution analytique bidimensionnelle de l'équation de diffusion dans le cas des structures silicium-sur-isolant

I. Sweid, N. Guillemot et G. Kamarinos

Laboratoire de Physique des Composants à Semiconducteurs, Unité Associée au CNRS n° 840, ENSERG, 23 Avenue des Martyrs 38031 Grenoble Cedex, France

(Reçu le 15 octobre 1987, révisé le 4 février 1988, accepté le 15 février 1988)

Résumé. — La redistribution d'impuretés dans les semiconducteurs lors des processus de réalisation des circuits intégrés constitue une étape d'une importance capitale pour la mise au point et le développement de filières. Ces profils de diffusion doivent être connus avec précision si l'on veut maîtriser et modéliser correctement le fonctionnement électrique des circuits intégrés. Actuellement, il existe de nombreux simulateurs bidimensionnels de processus sur silicium massif dont le plus connu reste SUPRA. Mais il ne sont pas assez généraux pour pouvoir simuler des processus sur d'autres structures (silicium-sur-isolant par exemple). Dans cet article, nous présentons une résolution analytique bidimensionnelle de l'équation de diffusion dans le cas d'une structure SIMOX (Separation by IMplanted OXYgen). Le modèle établi prend en compte les conditions limites propres à cette structure ainsi que le profil initial d'implantation. Comme exemple, nous simulons la formation de la zone d'isolement dans cette structure : implantation et redistribution du bore pendant la croissance de l'oxyde de champ.

Abstract. — The two-dimensional (2-D) redistribution of impurities in semiconductors is an important step for the research and fabrication of modern integrated circuits (VLSI). The diffusion profiles must be known precisely if one is to master and model correctly the operation of integrated circuits. Many two dimensional (2-D) simulators for processing bulk silicon do actually exist — SUPRA being the one most widely used nowadays ; however, they cannot simulate these processes on other structures — e.g. SOI (Silicon-On-Insulator). In this paper we present a two-dimensional (2-D) analytical solution of the diffusion equation for the case of the SIMOX structure. The developed model takes into account the limiting specific conditions associated with this structure as well as the initial ion implantation profile. As an example, we simulate the formation of the isolation zone in the SIMOX structure — i.e., the implantation and redistribution of boron during the formation of field oxide.

1. Introduction.

Dans le cadre d'une technologie CMOS submicronique, la structure SSI (Silicium-Sur-Isolant) offre de multiples avantages [1], à savoir :

- une isolation simple et totale des dispositifs entre eux par une technologie LOCOS (LOCAl Oxidation of Silicon) [2], ou par gravure d'îlots [1] ;
- une vitesse de fonctionnement plus rapide que sur silicium massif ;
- une simplification de la technologie par suppression des caissons.

Parmi les différentes structures SSI, le SIMOX (Separation by IMplanted OXYgen) où l'isolant est un oxyde obtenu par implantation d'oxygène, semble se rapprocher de la structure idéale [3].

Dans ce type de structure, lorsque l'isolement entre les transistors est réalisé par une technologie LOCOS, des charges positives persistent dans l'oxyde de champ et dans l'oxyde d'isolement. Ces charges sont compensées par du bore implanté à faible dose avant la formation de l'oxyde de champ comme pour l'isolement sur silicium massif (Fig. 1). Lors de la croissance de l'oxyde de champ, le bore se redistribue dans le silicium et les effets de cette diffusion doivent être pris en compte [4], en particulier pour les étapes technologiques qui suivent (implantation des sources et drains par exemple).

Dans cet article, les auteurs proposent une solution analytique bidimensionnelle pour simuler la diffusion d'impuretés dans le cas d'une structure SIMOX. La solution analytique a été retenue pour deux raisons :

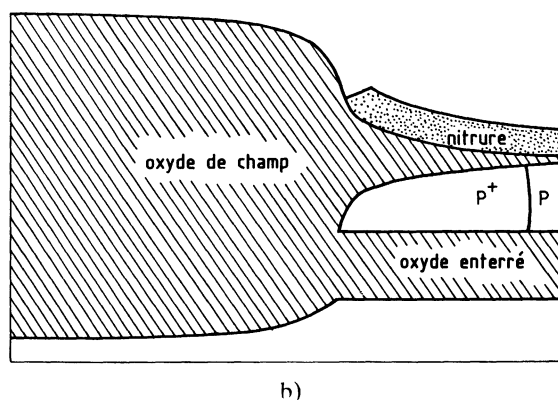
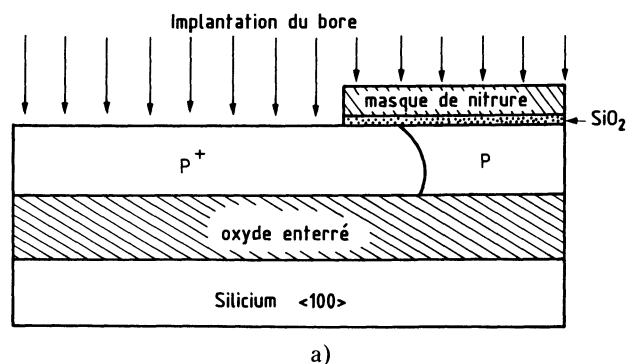


Fig. 1. — Réalisation de l'isolement dans le cas d'une structure SIMOX. (a) Définition des zones d'isolement suivie par une implantation d'une faible dose de bore, (b) réalisation de l'isolement par la croissance de l'oxyde de champ.

[Isolation formation in the case of SIMOX structure : (a) definition of the isolation zones followed by the implantation of a low dose of boron, (b) realisation of the isolation zones by the formation of the field oxide.]

— le calcul analytique permet un gain en temps CPU important sur un calcul numérique de type *éléments finis* ou *différences finies* au détriment d'une certaine précision, mais dans notre cas la résolution se fait dans une région du dispositif où une solution approchée est suffisante ;

— le domaine de résolution de l'équation de diffusion, à savoir le silicium, est variable au cours du temps (il est rectangulaire lors de l'implantation de bore et triangulaire une fois l'isolement terminé) ce qui rend difficile sa discrétisation [5-7].

Dans la première partie de cet article nous énonçons le problème (équation, conditions limites et géométrie du dispositif), puis une solution est donnée dans le cas d'un recuit sous atmosphère inerte et dans le cas d'une oxydation. En conclusion, nous présentons un exemple de simulation de la formation de l'oxyde de champ et de la redistribution du bore dans la zone d'isolement pour une structure SIMOX.

2. Enoncé du problème.

Dans la région d'isolement, le bore est implanté avec une dose suffisamment faible pour que sa concentration C reste inférieure à la concentration intrinsèque. Pour calculer sa redistribution pendant la formation de l'oxyde de champ, il faut résoudre l'équation classique de diffusion :

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x, y, t) + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}(x, y, t) \right] \quad (1)$$

sur le domaine de silicium Ω variable au cours du temps représenté sur la figure 2.

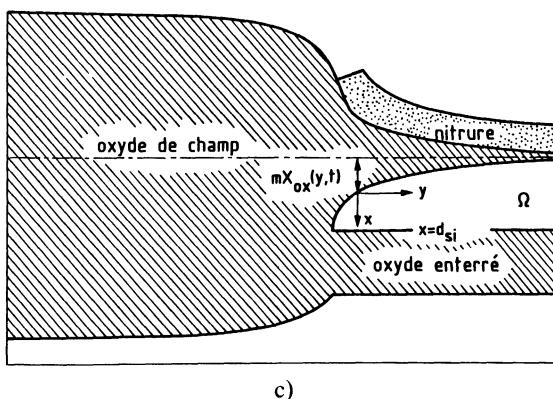
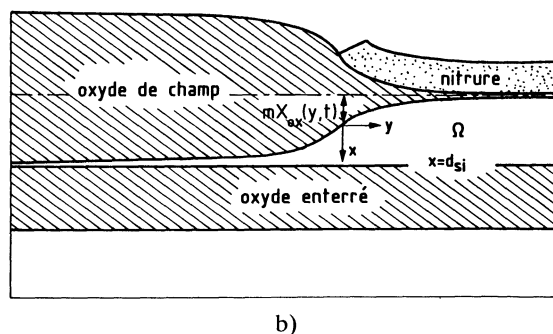
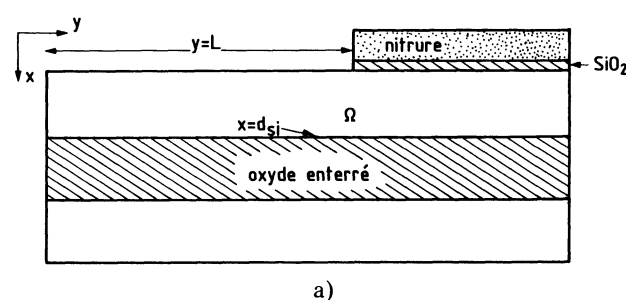


Fig. 2. — Géométries du domaine Ω de silicium au cours de la formation de l'oxyde de champ : (a) pendant l'implantation ionique, (b) au cours de l'oxydation, (c) en fin de croissance de l'oxyde.

[Geometries of the Ω domain in silicon during the field oxide formation : (a) during ion implantation, (b) during oxidation, (c) at the end of the oxide formation.]

Dans l'équation (1), D est le coefficient de diffusion intrinsèque, t le temps, x décrit le dispositif en profondeur et y en largeur.

L'implantation du bore dans un substrat de silicium protégé par un masque opaque localisé en L est modélisée par le convolution de 2 gaussiennes [8]. Soit $I(x, y)$ la concentration en chaque point après implantation, alors :

$$I(x, y) = \frac{I_{\max}}{2} \exp \left[- \left(\frac{x - r_{px}}{\sqrt{2} d_{rpx}} \right)^2 \right] \times \operatorname{erfc} \left(\frac{y - L}{\sqrt{2} d_{rpy}} \right) \quad (2)$$

avec :

$$I_{\max} = \frac{N_d}{\sqrt{\frac{\pi}{2}} d_{rpx} [1 + \operatorname{erf}(r_{px}/\sqrt{2} d_{rpx})]}$$

où

N_d est la dose implantée,

r_{px} la profondeur moyenne de pénétration des ions dans le silicium,

d_{rpx} et d_{rpy} les écarts-type de la distribution des ions dans le silicium en x et y respectivement.

Nous avons donc comme condition initiale $C(x, y, 0) = I(x, y)$. Il a été montré de plus que l'interface Si/SiO₂ peut être considéré comme une barrière de diffusion [9], la condition limite au fond du substrat ($x = d_{si}$) s'écrit alors :

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x, y, t) \Big|_{x=d_{si}} = 0. \quad (3)$$

3. Calcul de la redistribution en atmosphère inerte.

L'étape d'implantation est généralement suivie d'une montée en température sous azote avant l'étape d'oxydation, il est par conséquent nécessaire de calculer la diffusion de l'impureté en atmosphère inerte. Pendant ce recuit la surface de silicium est passivée par un oxyde mince (l'oxyde piédestal ou un oxyde natif), la condition (3) peut s'appliquer en $x = 0$. On est donc amené à résoudre :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) &= D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x, y, t) + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}(x, y, t) \right] \text{ sur } \Omega \\ \frac{\partial C}{\partial x}(x, y, t) \Big|_{x=0} &= 0 \\ \frac{\partial C}{\partial x}(x, y, t) \Big|_{x=d_{si}} &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Pour une implantation en fonction δ localisée en (x', y') (soit $C(x, y, 0) = \delta(x - x') \delta(y - y')$) la solution du système (4) est [10] :

$$C_1(x, y, t) = \left(\frac{1}{4 \pi D t} \right) \exp \left(- \frac{(y - y')^2}{4 D t} \right) x \left\{ \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \left[\exp \left(- \frac{(x - x' + 2 n d_{si})^2}{4 D t} \right) + \exp \left(- \frac{(x + x' + 2 n d_{si})^2}{4 D t} \right) \right] \right\} \quad (5)$$

sachant que

$$\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \exp \left(- \frac{(x - x' + 2 n d_{si})^2}{4 D t} \right) = \frac{\sqrt{\pi D t}}{d_{si}} \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{n=+\infty} \cos \left(\frac{n \pi (x - x')}{d_{si}} \right) \exp \left(- \frac{D n^2 \pi^2 t}{d_{si}^2} \right) \right\} \quad (5.1)$$

et

$$\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \exp \left(- \frac{(x + x' + 2 n d_{si})^2}{4 D t} \right) = \frac{\sqrt{\pi D t}}{d_{si}} \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{n=+\infty} \cos \left(\frac{n \pi (x + x')}{d_{si}} \right) \exp \left(- \frac{D n^2 \pi^2 t}{d_{si}^2} \right) \right\} \quad (5.2)$$

(5) devient

$$C_1(x, y, t) = \left(\frac{1}{4 \pi D t} \right) \left(\frac{1}{2 d_{si}} \right) \exp \left(- \frac{(y - y')^2}{4 D t} \right) \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{n=+\infty} \cos \left(\frac{n \pi x}{d_{si}} \right) x \cos \left(\frac{n \pi x'}{d_{si}} \right) \exp \left(- \frac{D n^2 \pi^2 t}{d_{si}^2} \right) \right\}. \quad (6)$$

Pour un profil initial d'implantation gaussien $I(x', y')$, la solution de (4) est [11]

$$C(x, y, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_0^{d_{si}} C_1(x, y, t) I(x', y') dx' = C_x(x, t) C_y(y, t) \quad (7)$$

avec

$$C_x(x, t) = \left(\frac{I_{\max}}{2 d_{\text{si}}} \right) \left[I_2 + 2 \sum_{n=1}^{n=+\infty} \cos \left(\frac{n \pi x}{d_{\text{si}}} \right) I_3(n) \exp \left(- \frac{D n^2 \pi^2 t}{d_{\text{si}}^2} \right) \right] \quad (7.1)$$

et

$$C_y(y, t) = \operatorname{erfc} \left(\frac{y - L}{\sqrt{4 D t + 2 d_{\text{rpy}}^2}} \right) \quad (7.2)$$

I_2 est donné par la relation :

$$I_2 = \sqrt{\pi/2} d_{\text{rpx}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{r_{\text{px}}}{\sqrt{2} d_{\text{rpx}}} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{d_{\text{si}} - r_{\text{px}}}{\sqrt{2} d_{\text{rpx}}} \right) \right] \quad (7.3)$$

et $I_3(n)$ par l'intégrale

$$I_3(n) = \int_0^{d_{\text{si}}} \cos \left(\frac{n \pi x'}{d_{\text{si}}} \right) \exp \left[- \left(\frac{x' - r_{\text{px}}}{\sqrt{2} d_{\text{rpx}}} \right)^2 \right] dx' . \quad (7.4)$$

On constate que le profil de redistribution en (7) est le produit d'un profil vertical et d'un profil horizontal. Cette forme permet une évaluation rapide du profil de concentration.

4. Calcul de la redistribution en atmosphère oxydante.

Pour calculer à une dimension la redistribution d'impuretés en atmosphère oxydante Huan et Welliver [12] ont exprimé la concentration $C(x, t)$ comme somme de la distribution d'impuretés en atmosphère inerte $C_i(x, t)$, et d'un facteur de correction $C_c(x, t)$, soit :

$$C(x, t) = C_i(x, t) + C_c(x, t) . \quad (8)$$

Cette même idée a été reprise par Lee et Dutton [13] pour simuler la redistribution bidimensionnelle d'impuretés. Ils proposent un profil de diffusion sous la forme :

$$C(x, y, t) = C_i(x, y, t) + C_c(x, y, t) \quad (9)$$

où

$C_i(x, y, t)$ est le profil de concentration en atmosphère inerte — mais en utilisant le coefficient de diffusion sous oxydation pour prendre en compte les effets d'OED (Oxidation Enhanced Diffusion) —, et $C_c(x, y, t)$ est le terme de correction qui tient compte de ségrégation à l'interface Si/(oxyde de champ) ainsi que l'échange volumique entre les atomes de silicium et ceux de l'oxyde.

Le profil $C_i(x, y, t)$ est obtenu par la relation :

$$C_i(x, y, t) = C_{1x}(x, t) C_y(y, t) \quad (10.1)$$

avec

$$C_{1x}(x, t) = \frac{I_{\max}}{2 d_{\text{si}}} \left[I_2 + 2 \sum_{n=1}^{n=+\infty} I_3(n) \cos \left(\frac{n \pi (x + m X_{\text{ox}}(y, t))}{d_{\text{si}}} \right) \exp \left(- \frac{D n^2 \pi^2 t}{d_{\text{si}}^2} \right) \right] \quad (10.2)$$

et

$C_y(y, t)$ est donné par (7.1) ;

I_2 et $I_3(n)$ sont donnés par (7.3) et (7.4) ;

m est le rapport de l'épaisseur du silicium consommé sur l'épaisseur d'oxyde formé,

$X_{\text{ox}}(y, t)$ est l'épaisseur d'oxyde au point y et à l'instant t .

La différence entre (7.1) et (10.2) vient du fait que l'origine des abscisses reste localisée à l'interface Si/(oxyde de champ) (Fig. 2).

Pour déterminer le terme $C_c(x, y, t)$ dans (9), on utilise la condition à l'interface Si/(oxyde de champ) qui exprime la conservation des flux à l'interface et néglige la diffusion dans l'oxyde ; à savoir

$$D \frac{\partial C_c}{\partial x}(x, y, t) \Big|_{x=0} = \left(\frac{1}{k} - m \right) C(0, y, t) V_{\text{ox}}(y, t) - D \frac{\partial C_i}{\partial x}(x, y, t) \Big|_{x=0} \quad (11)$$

où

$$k = \frac{C_{\text{si}}}{C_{\text{ox}}} \Big|_{x=0}$$

est le coefficient de ségrégation à l'interface et

$$V_{\text{ox}}(y, t) = \frac{\partial X_{\text{ox}}}{\partial t}(y, t)$$

la vitesse de croissance de l'oxyde au point y et à l'instant t .

La condition (11) est vraie quel que soit le point à l'interface et quel que soit t [13], par conséquent $C_c(x, y, t)$ doit avoir la même dépendance en y que $C_i(x, y, t)$. Soit :

$$C_c(x, y, t) = C_{2x}(x, t) C_y(y, t). \quad (12)$$

En reportant (12) dans (11), cette condition devient

$$D \left(\frac{\partial C_{1x}}{\partial x}(x, t) \Big|_{x=0} \right) = (1/k - m)[C_{1x}(0, t) + C_{2x}(0, t)] V_{\text{ox}}(y, t) - D \frac{\partial C_{2x}}{\partial x}(x, t) \Big|_{x=0}. \quad (13)$$

Il est difficile, sinon impossible d'obtenir une solution exacte pour $C_{2x}(x, t)$, mais une bonne approximation a été établie dans [11]

$$C_{2x}(x, t) = A \operatorname{erfc} \left(\frac{x + mX_{\text{ox}}(y, t)}{2\sqrt{Dt}} \right). \quad (14)$$

Le coefficient A est déterminé à l'aide de (13)

$$A = \frac{D(\partial C_{1x}(x, t)/\partial x|_{x=0}) - (1/k - m) V_{\text{ox}}(y, t) C_{1x}(0, t)}{(1/k - m) V_{\text{ox}}(y, t) \operatorname{erfc} \left(\frac{mX_{\text{ox}}}{2\sqrt{Dt}} \right) + \frac{D}{\sqrt{\pi Dt}} \exp \left[- \left(\frac{mX_{\text{ox}}}{2\sqrt{Dt}} \right)^2 \right]}. \quad (14.1)$$

5. Simulation de la redistribution du bore à 2-D.

Dans cette partie, nous donnons un exemple de résolution analytique bidimensionnelle de l'équation de diffusion dans les structures SOI. Nous avons simulé la formation de la zone d'isolement dans une structure SIMOX composé d'un oxyde enterré de $0,3 \mu\text{m}$ surmonté de $0,32 \mu\text{m}$ de silicium dopé P à 10^{15}cm^{-2} . L'oxyde de champ est formé selon la séquence technologique classique composé des étapes suivantes :

- oxydation piédestale ($0,015 \mu\text{m}$),
- dépôt de nitrure ($0,12 \mu\text{m}$), puis gravure,
- implantation du bore (100 keV , $4 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$).

La croissance de l'oxyde de champ se fait en deux étapes : une montée en température de 850°C à 1000°C sous azote, suivie d'une oxydation humide à 1000°C pendant 300 min.

Le modèle choisi pour simuler la croissance de l'oxyde est celui développé par N. Guillemot *et al.* dans le cas d'une technologie LOCOS [14]. Lorsque l'oxyde de champ rejoint l'oxyde enterré, nous avons supposé que ce dernier se comporte comme

un oxyde thermique et que sa croissance suivait alors une loi classique de Deal et Grove [15].

Sur la figure 3 est présenté le résultat de la simulation de la formation de la zone d'isolement dans une structure SIMOX, avec la croissance de l'oxyde de champ et la diffusion du bore représenté par ses contours d'isoconcentrations.

Conclusion.

Les auteurs ont présenté dans cet article une solution semi-analytique bidimensionnelle de l'équation de diffusion pour une structure SSI, dans le cas d'un recuit oxydant ou inerte. Cette résolution a été utilisée pour simuler la redistribution du bore implanté dans la zone d'isolement lors de la formation de l'oxyde de champ.

Cette méthode, très économique en temps CPU, donne d'excellents résultats dans le cas de faibles dopages. Le logiciel ainsi développé sera inclus ultérieurement à un simulateur bidimensionnel de processus technologique sur SIMOX.

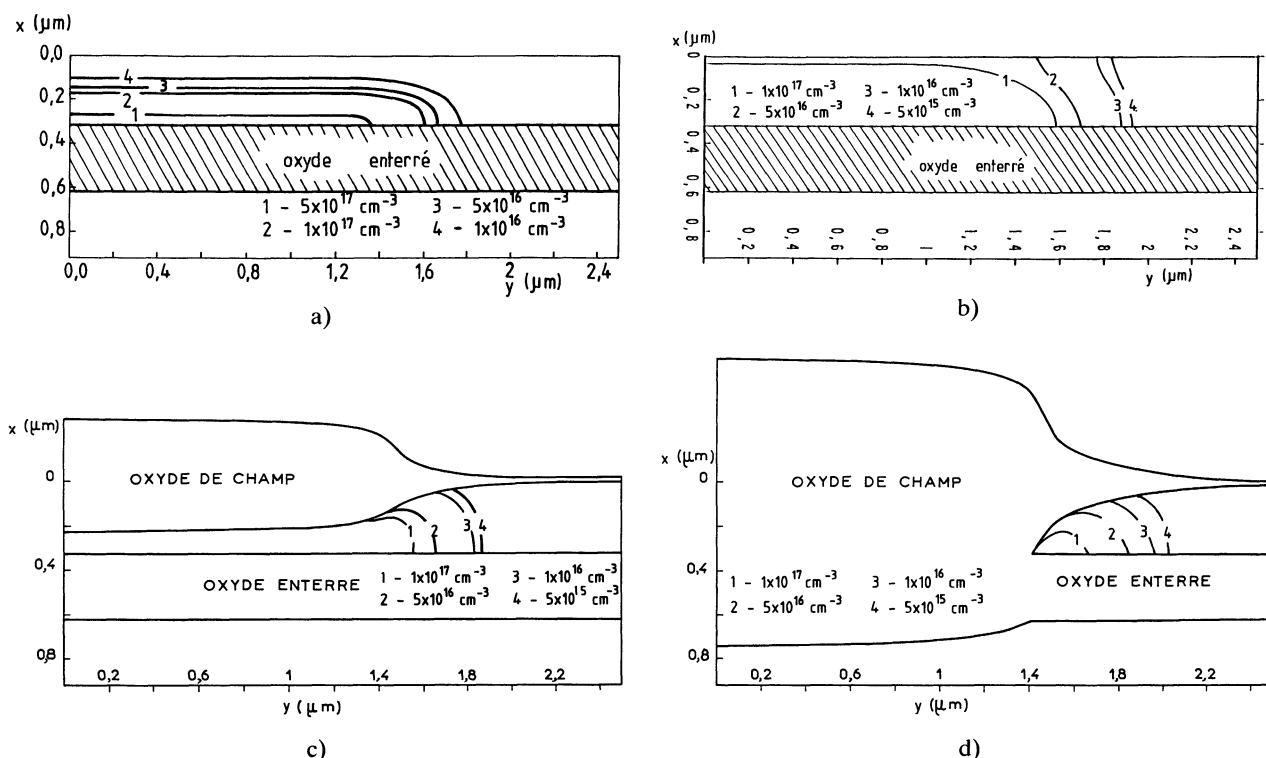


Fig. 3. — Résultats des simulations, montrant les contours d'isoconcentrations du bore ainsi que la forme de l'oxyde de champ à la fin du processus : (a) profil initial d'implantation, (b) recuit en atmosphère inerte, (c) recuit en atmosphère oxydante avant que l'oxyde de champ ne rejoigne l'oxyde enterré, (d) recuit en atmosphère oxydante en fin de processus.

[Results of simulations showing equidensity contours and corresponding oxide shape at the end of process : (a) ion implantation profile, (b) inert Drive-In, (c) oxidizing ambient Drive-In before the field oxide joins the buried SiO_2 , (d) oxidizing ambient Drive-In at the end of the process.]

Bibliographie

- [1] PARTRIDGE, S. L., *Solid State Devices 1985* (Elsevier Science Publishers B. V., the Netherlands) 1986, p. 115.
- [2] APPELS, J. A. and PAFFEN, M. M., Local oxidation of silicon; new technological aspects *Philips Res. Rep.*, **26** (1971) 157.
- [3] STOEMENOS, J., JAUSSAUD, C., BRUEL, M. et MARGAIL, J., New conditions for synthesizing SOI structures by high dose oxygen implantation *J. Cryst. Growth*, **73** (1985) 546.
- [4] KENNEDY, D. P. and O'BRIEN, R. R., Analysis of the impurity atom distribution near the diffusion mask for a planar P-N junction, *IBM J. Res. Dev.* (1965) p. 179.
- [5] GUILLEMOT, N., Simulation bidimensionnelle des processus technologiques du silicium, élaboration du programme OSIRIS, Thèse I.N.P. Grenoble (1986).
- [6] PENUMALLI, B. R., A comprehensive two-dimensional VLSI process simulation program, BICEPS, *IEEE Trans. Electron. Devices* **ED-30** (1983) 986.
- [7] PENUMALLI, B. R., Lateral oxidation and redistribution of dopants *Proc. NASECODE II Conf.* Trinity college (Dublin) 1981, p. 264.
- [8] FURUKAWA, S., MATSUMURA, H. and ISHIWARA, H., Theoretical considerations on lateral spread of implanted ions. *Jpn. J. Appl. Phys.* **11** (1972) 134.
- [9] DOUGLAS, E. C. and DINGWALL, A. G. F., Ion implantation for threshold in COSMOS circuits, *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-21** (1974) 324.
- [10] CARSLAW, H. S. and JAEGER, J. C., *Conduction Of Heat In Solids*, (Clarendon Press, Oxford) (1959) p. 273.
- [11] SELBERHERR, S., *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices* (Springer-Verlag, New York) 1984, p. 71.
- [12] HUANG, J. S. T., WELLIVER, L. C., On the redistribution of boron in the diffused layer during thermal oxidation, *J. Electrochem. Soc.* **117** (1970) 1577.
- [13] LEE, H. G. and DUTTON, R., Two-dimensional low concentrations boron profiles modeling and measurement, *IEEE Trans. Electron. Devices* **ED-28** (1981) 1136.
- [14] GUILLEMOT, N., PANANAKAKIS, G. and CHENEVIER, P., A new analytical model of the Bird's Beak, *IEEE Trans. Electron. Devices* **ED-34** (1987) 1033.
- [15] DEAL, B. E. and GROVE, A. S., General relationship for thermal oxidation of silicon, *J. Appl. Phys.* **36** (1965) 3770.