

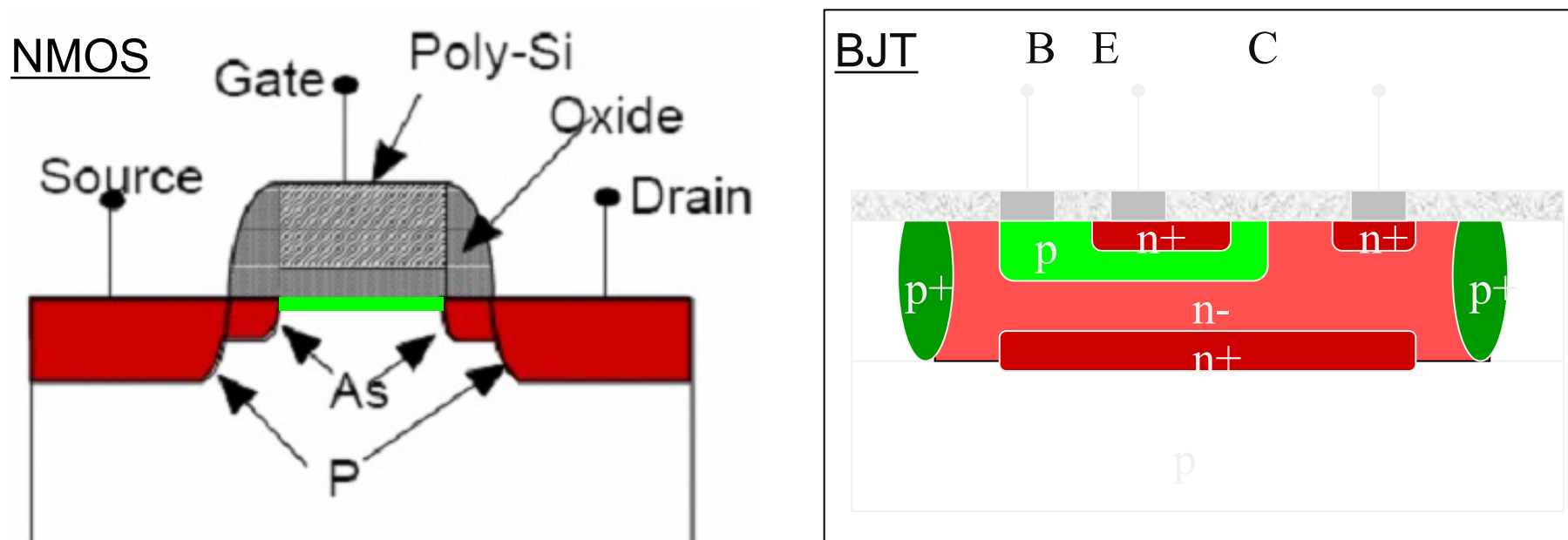
集成电路工艺原理

上海电力大学

邱丽娜、刘伟景

第五章 热扩散(上)

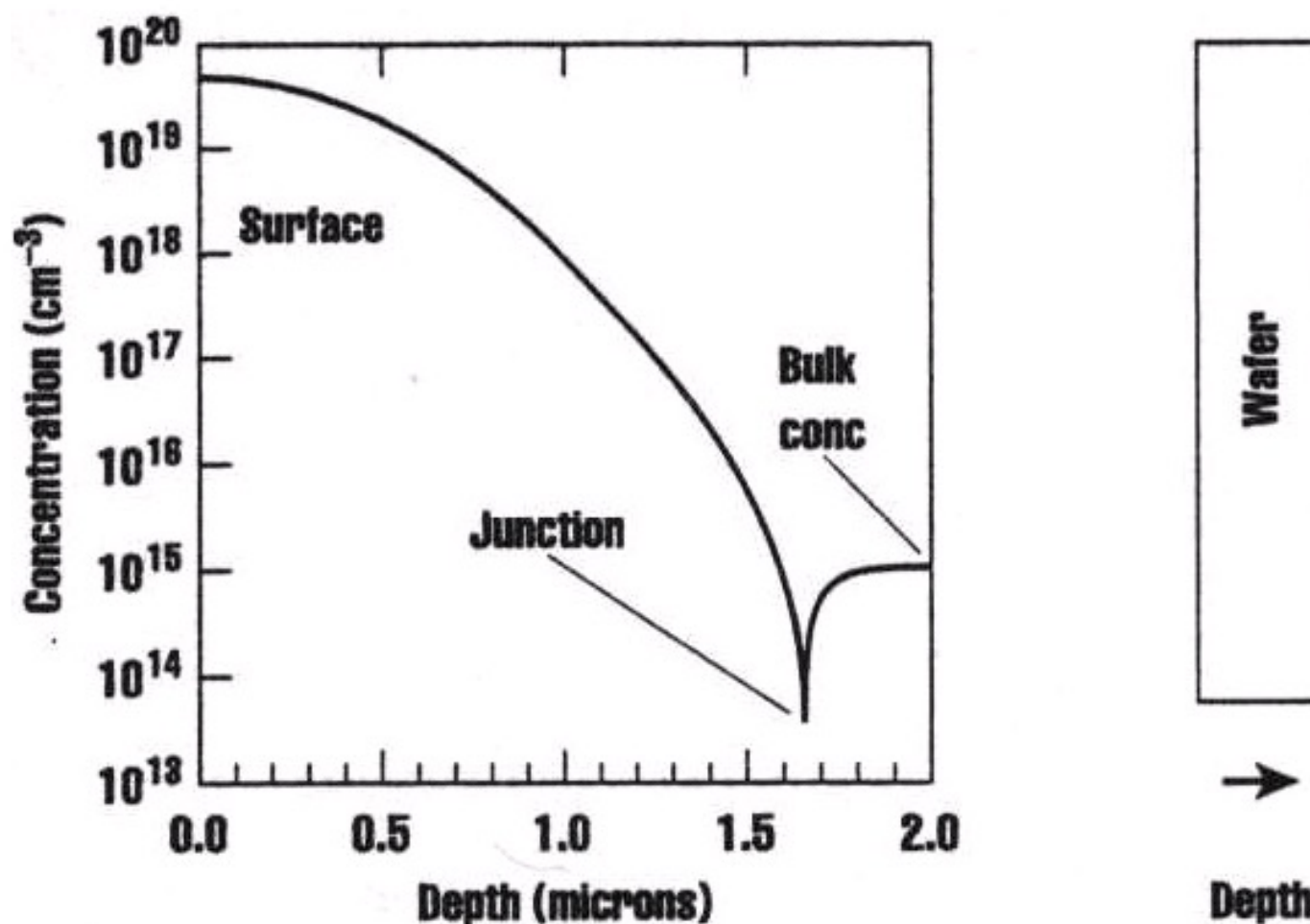
掺杂（doping）：将一定数量和一定种类的杂质掺入硅中，并获得精确的杂质分布形状（doping profile）。



掺杂应用：

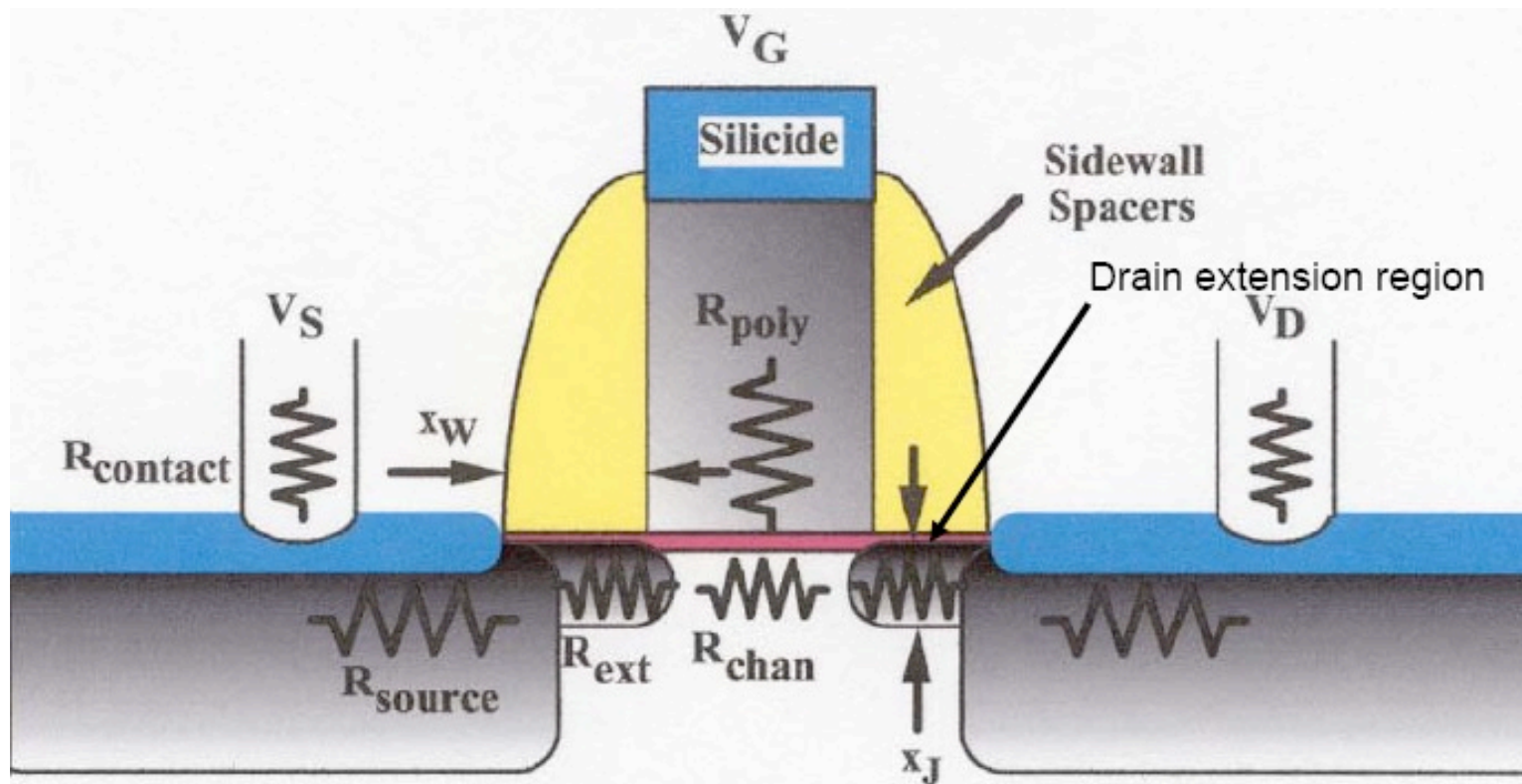
MOSFET：阱、栅、源/漏、沟道等
BJT：基极、发射极、集电极等

杂质分布形状 (doping profile) 举例



第五章 热扩散⁴(上)

基本概念



- ✓ 结深 x_j (Junction Depth)
- ✓ 薄层电阻 R_s (Sheet Resistance)
- ✓ 杂质固溶度 (Solubility)

第五章 热扩散(上)

1、结深的定义

x_j : 当 $x = x_j$ 处
 C_x (扩散杂质浓度) = C_B (本体浓度)

- ✓ 器件等比例缩小 k 倍, 等电场要求 x_j 同时缩小 k 倍
- ✓ 同时

$$2R_{\text{contact}} + R_{\text{source}} + R_{\text{drain}} + 2R_{\text{ext}} < 0.10 (R_{\text{channel}})$$

要求 x_j 增大

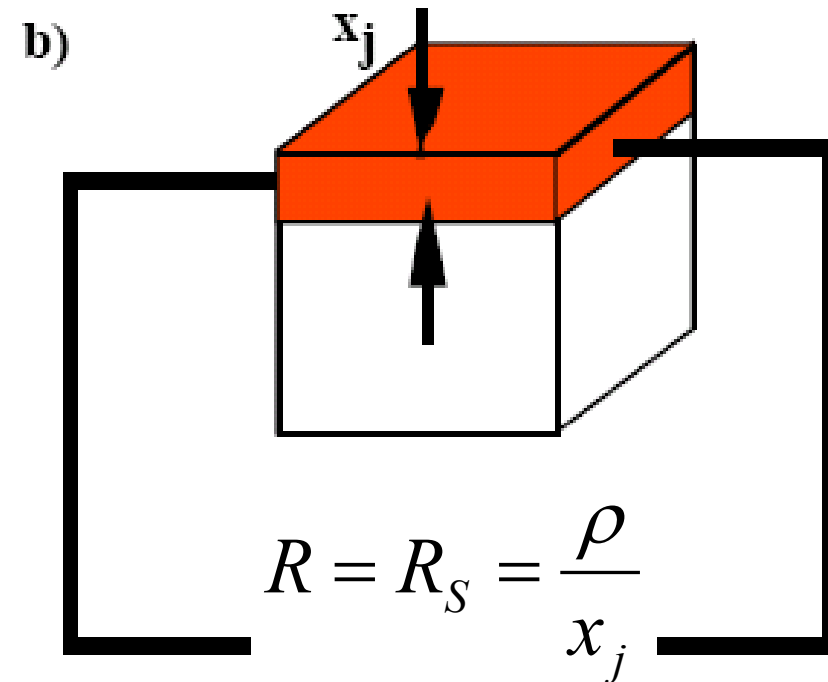
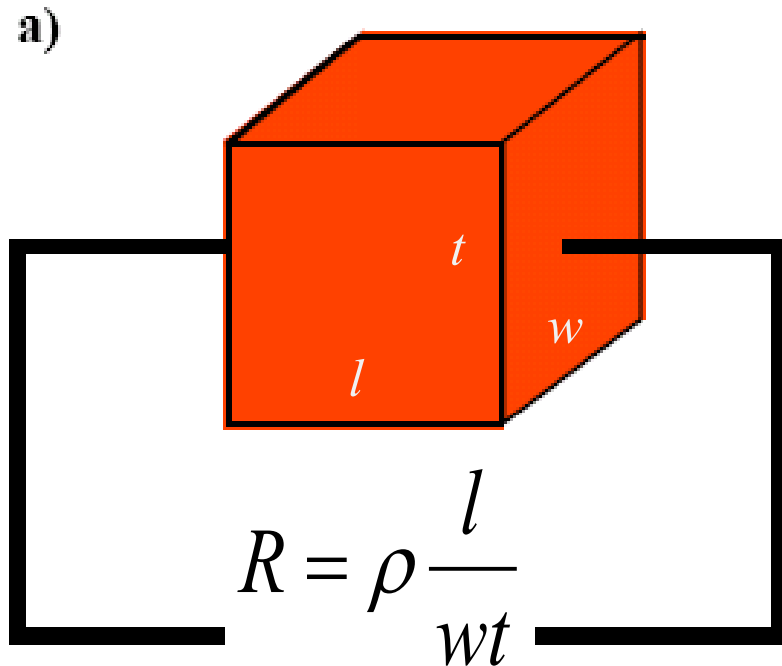
在现代COMS技术中, 采用浅结和高掺杂来同时满足两方面的要求

第五章 热扩散(上)

2、薄层电阻 R_s (sheet resistance)

方块电阻

薄层电阻定义为 $R_s = \frac{\rho}{x_j}$



第五章 热扩散(上)

R_s : 表面为正方形的半导体薄层，在电流方向呈现的电阻。单位为 Ω/\square

R_s : 正方形边长无关

$$R = \rho \frac{l}{A} = \rho \frac{l}{wx_j} = \frac{\rho}{x_j} \frac{l}{w} = R_s \frac{l}{w}$$

方块时， $l=w$ ， $R=R_s$ 。所以，只要知道了某个掺杂区域的方块电阻，就知道了整个掺杂区域的电阻值。

其重要性：薄层电阻的大小直接反映了扩散入硅内部的净杂质总量

第五章 热扩散(上)

物理意义： 薄层电阻的大小直接反映了扩散入硅内部的净杂质总量

$$\sigma = qn\mu \quad \rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{qn\mu}$$

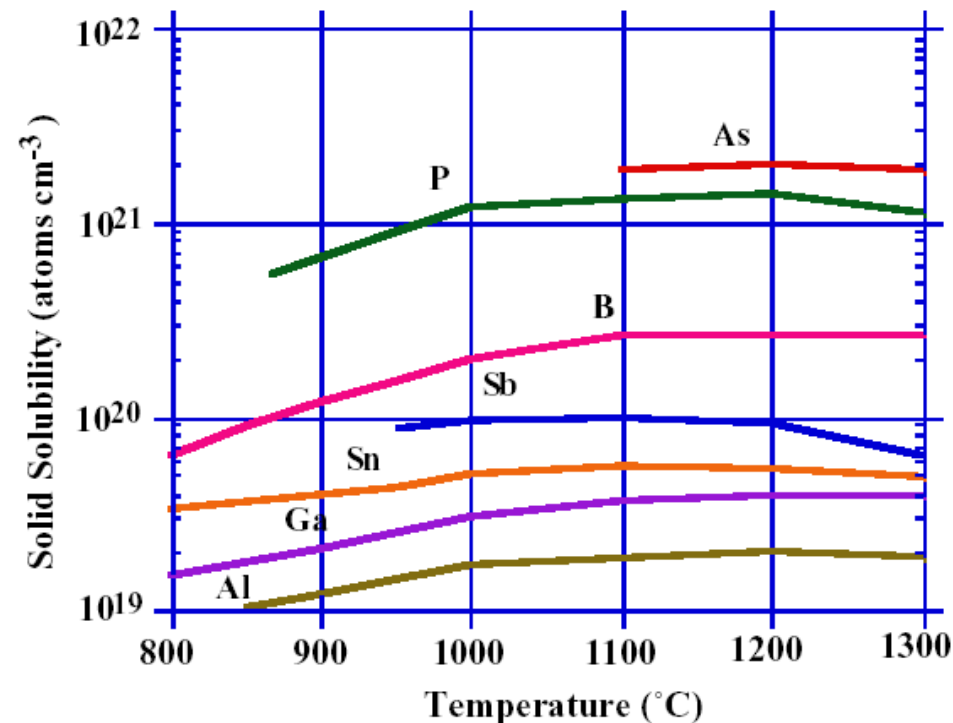
q 电荷, μ 载流子迁移率, n 载流子浓度
假定杂质全部电离
载流子浓度 $n =$ 杂质浓度 N 则:

$$R_s = \frac{\rho}{x_j} = \frac{1}{\sigma x_j} = \frac{1}{q\mu N x_j} = \frac{1}{q\mu Q}$$

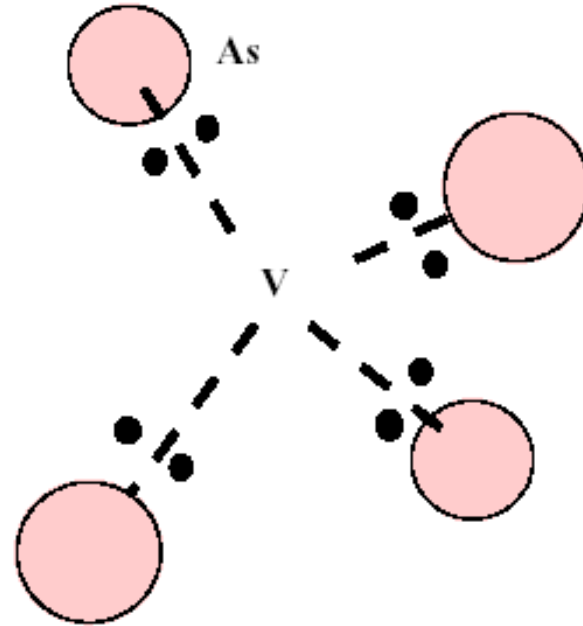
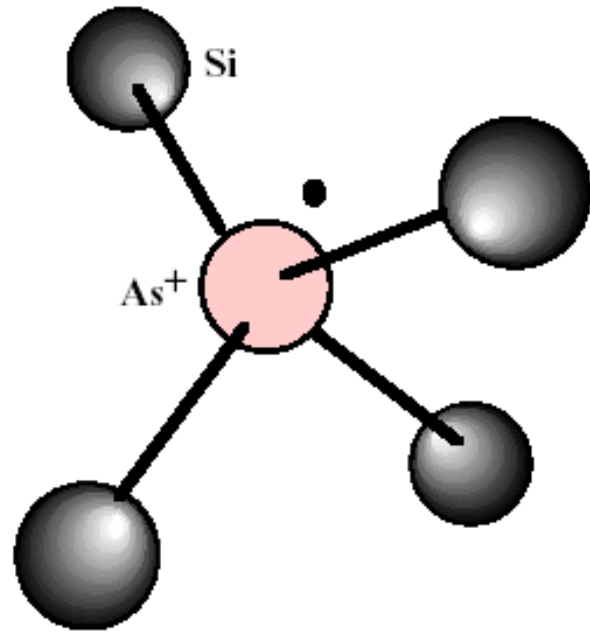
Q : 从表面到结边界这一方块薄层中单位面积上杂质总量

3、杂质固溶度 (dopant solid solubility)

- ✓ 固溶度 (solid solubility)：在平衡条件下，杂质能溶解在硅中而不发生反应形成分凝相的最大浓度。
- ✓ 电固溶度
- ✓ 超过电固溶度的杂质可能形成电中性的聚合物，对掺杂区的自由载流子不贡献



第五章 热扩散(上)



- As_4V is one possible electrically inactive form.

As在硅中的固溶度: $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$

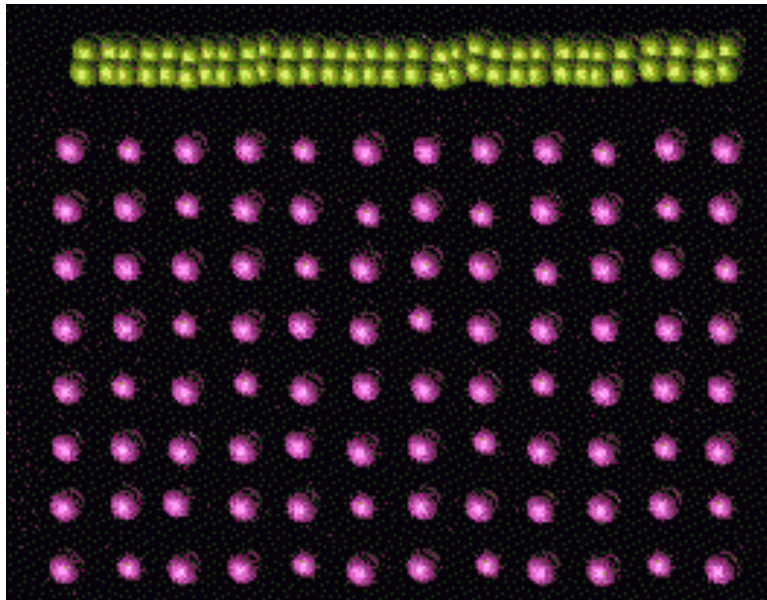
As的电学可激活浓度: $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$

第五章 热扩散(上)

B, P, 一般作为替位式扩散杂质, 实际情况更复杂, 包含了硅自间隙原子的作用, 称填隙式或推填式扩散

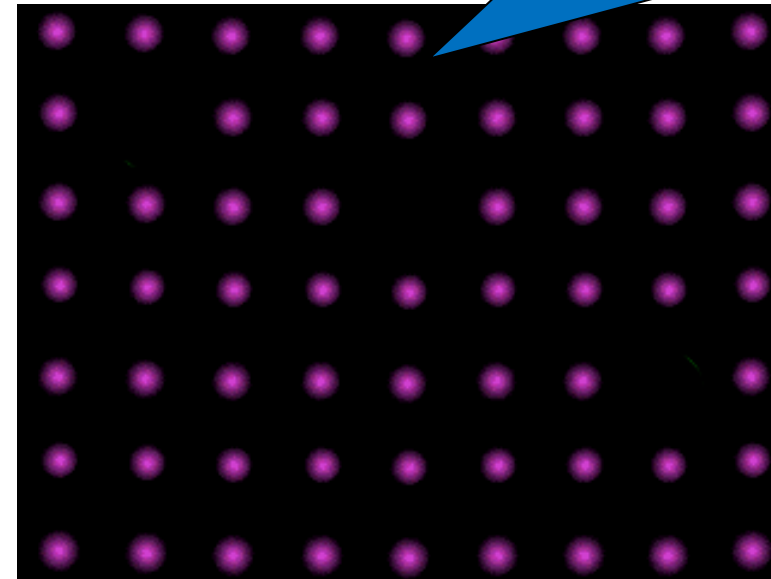
扩散的微观机制

(a) 间隙式扩散 (interstitial)



间隙扩散杂质 Au, Fe,
Cu, Ni, Zn, Mg

(b) 替位式扩散 (substitutional)



替位扩散杂质: P, As, B, Al, Ga,
Sb, Ge。

替位原子的运动一般是以近邻处有空位为前提

第五章 热扩散(上)

(c) 填隙式 (interstitial assisted kick-out)或推填式扩散 (Interstitialcy-assited)

Models and Simulati

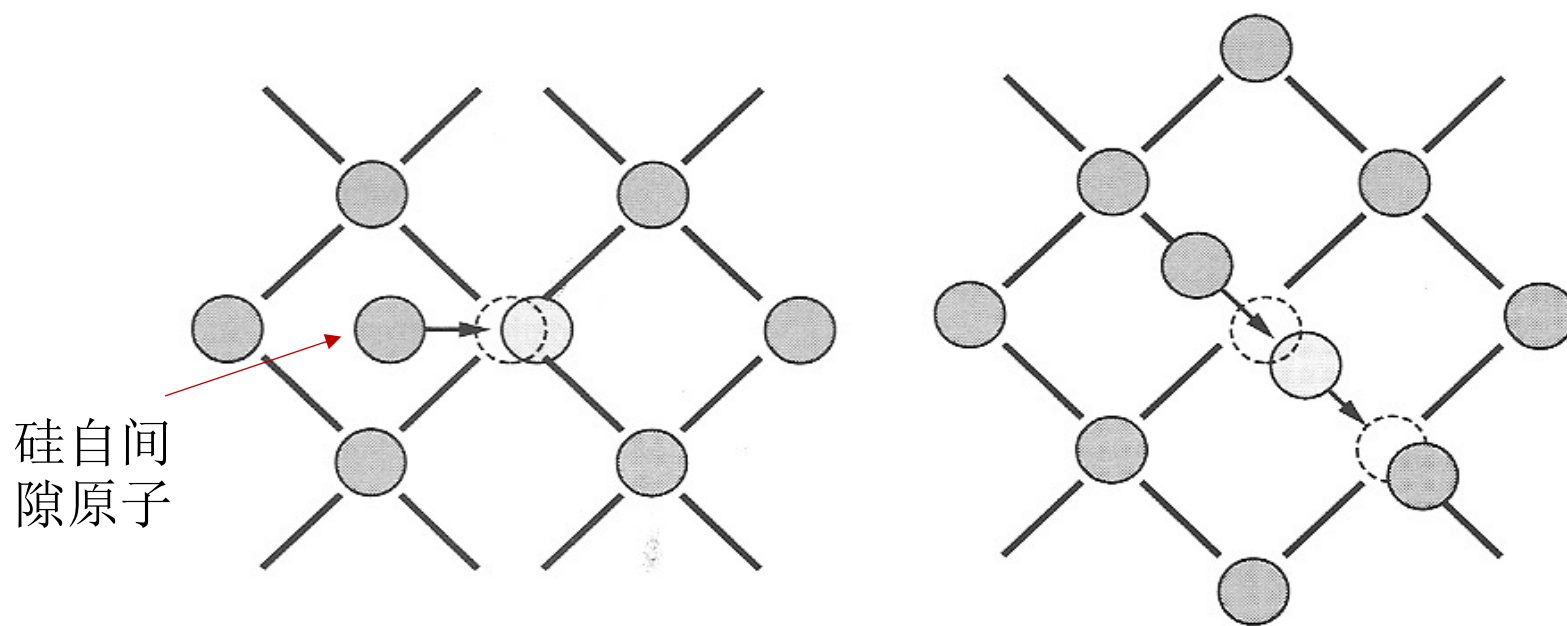
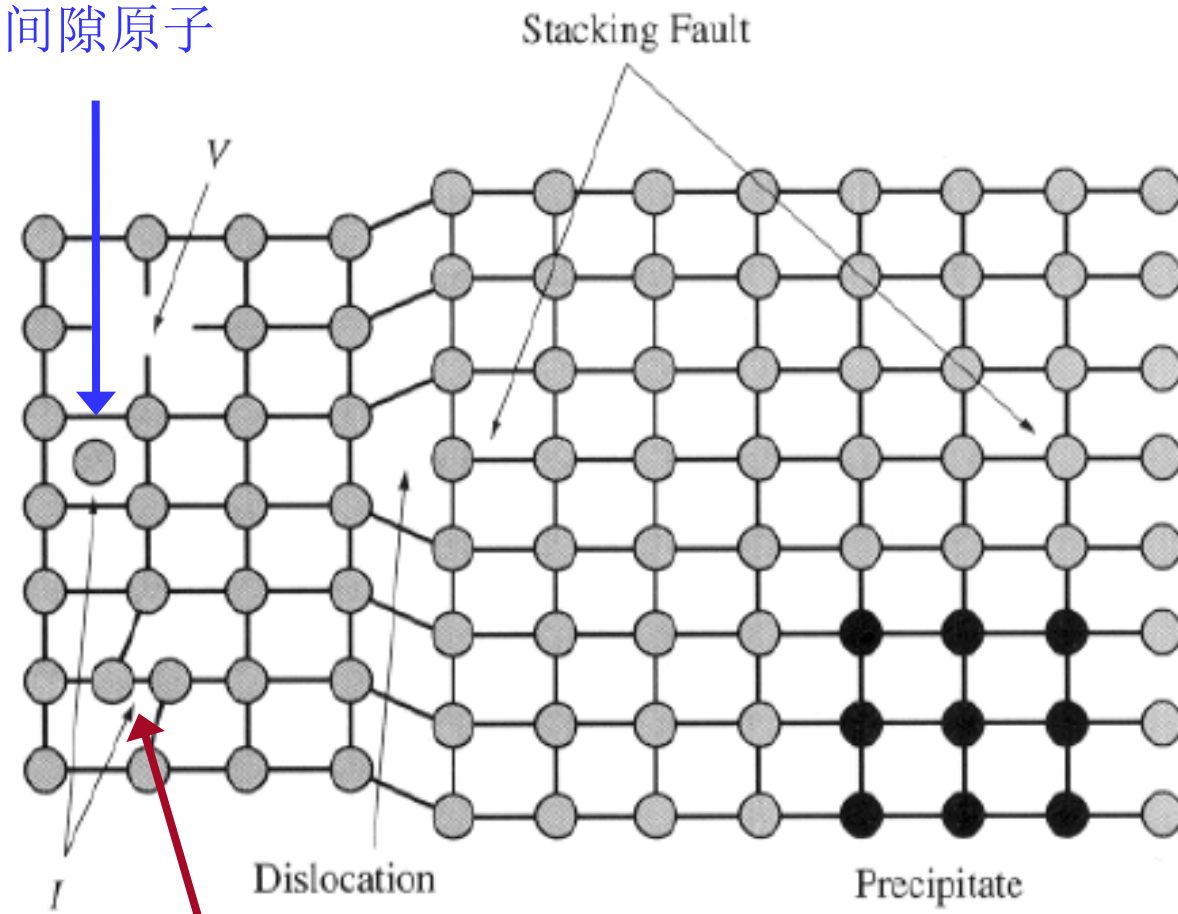


Figure 7-35 Schematic of interstitial assisted kick-out diffusion (left) and interstitialcy-assisted diffusion (right) mechanisms.

第五章 热扩散(上)

13

间隙原子



推填子

第五章 热扩散¹⁴(上)

间隙式扩散: Au, Ag, Cu, Fe, Ni等

✓ 间隙原子必须越过的势垒高度 E_i

E_i 约为0.6 ~ 1.2 eV

✓ 跳跃几率和温度有关

振动频率 $\nu_0 = 10^{13} \sim 10^{14}/s$

✓ 快扩散杂质

$$P_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$$

T : 绝对温度, k : 玻尔兹曼常数

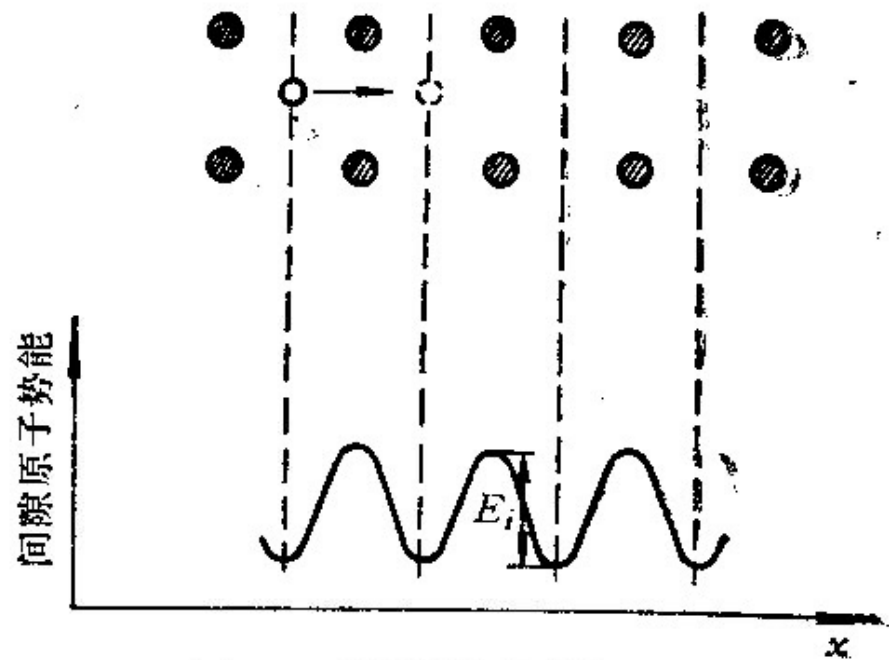


图4-3 间隙原子的势能曲线

第五章 热扩散¹⁵(上)

替位式扩散： B, P, As, Sb等

- ✓ 在温度 T ，单位晶体体积中的空位数
- ✓ 每一格点出现空位的几率为 N_v/N ，替位式原子必须越过的势垒高度为 E_s ； E_s 约3 ~ 4 eV
- ✓ 跳跃几率为

$$P_v = \exp\left(-\frac{E_{vac}}{kT}\right) \cdot v_0 \exp\left(-\frac{E_s}{kT}\right)$$

$$= v_0 \exp\left(-\frac{E_{vac} + E_s}{kT}\right)$$

- ✓ 慢扩散杂质

$$N_v = N \exp\left(-\frac{E_{vac}}{kT}\right)$$

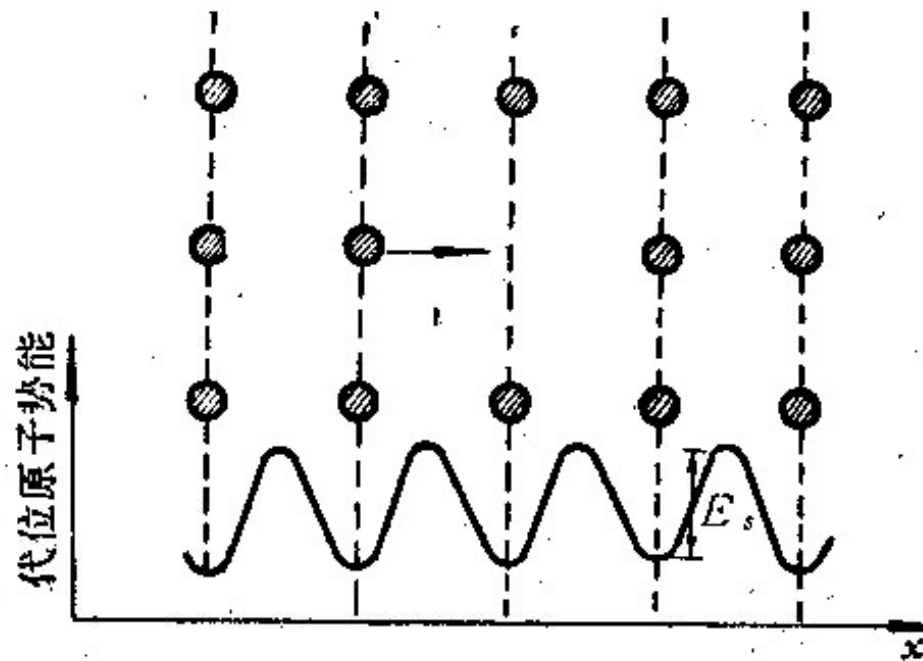


图4-5 代位式杂质的扩散

本征扩散系数

当 N_A 、 $N_D < n_i$ （在一定温度下）时，称为本征掺杂。

$$D_i = D^0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right)$$

E_a : 本征扩散激活能,
 D^0 和温度弱相关, 而主要取决于晶格
几何尺寸和振动频率 ν_0

表观扩散系数:

$$D^0 = a^2 \nu_0$$

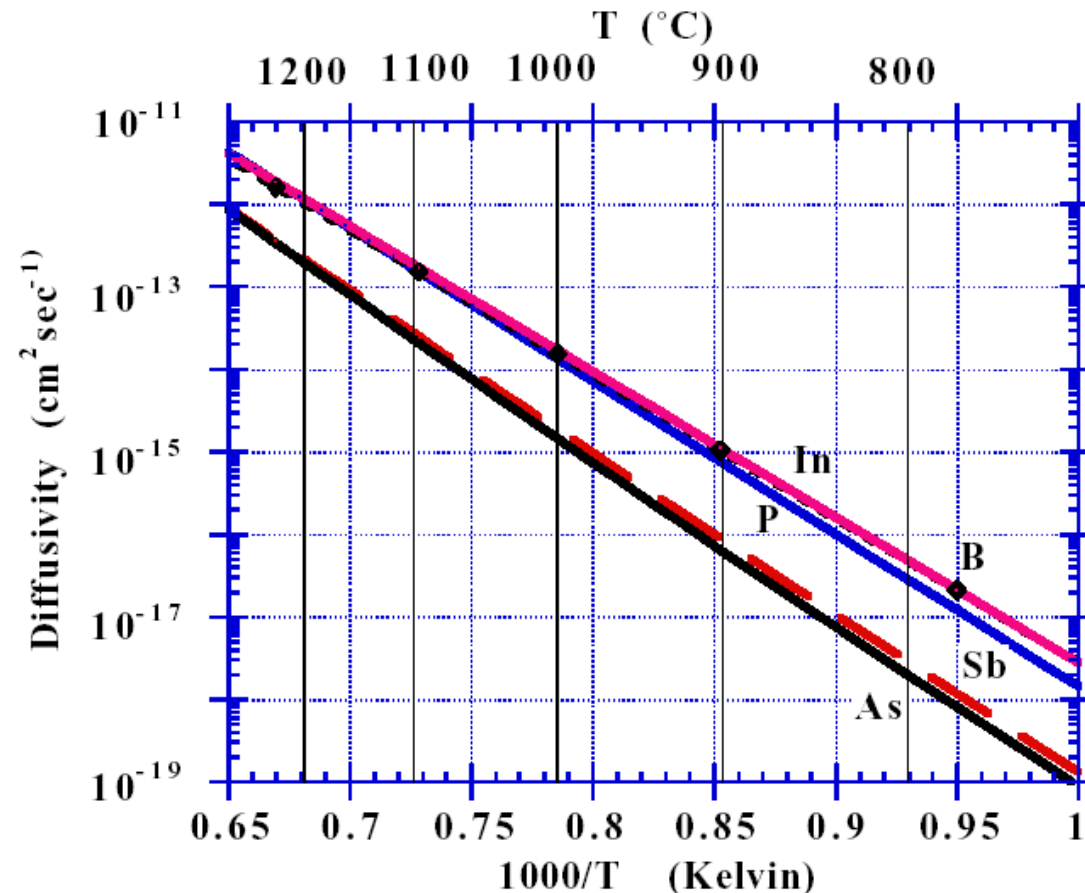
D : cm^2/sec

第五章 热扩散(上)

半导体工艺中常用掺杂原子在单晶硅中的本征扩散系数因子和激活能

	$D^0(\text{cm}^2/\text{s})$	$E_a(\text{eV})$
B	1.0	3.46
In	1.2	3.50
P	4.70	3.68
As	9.17	3.99
Sb	4.58	3.88

As的优势:
小 D , 大固溶度



扩散的宏观机制

(diffusion from a macroscopic viewpoint)

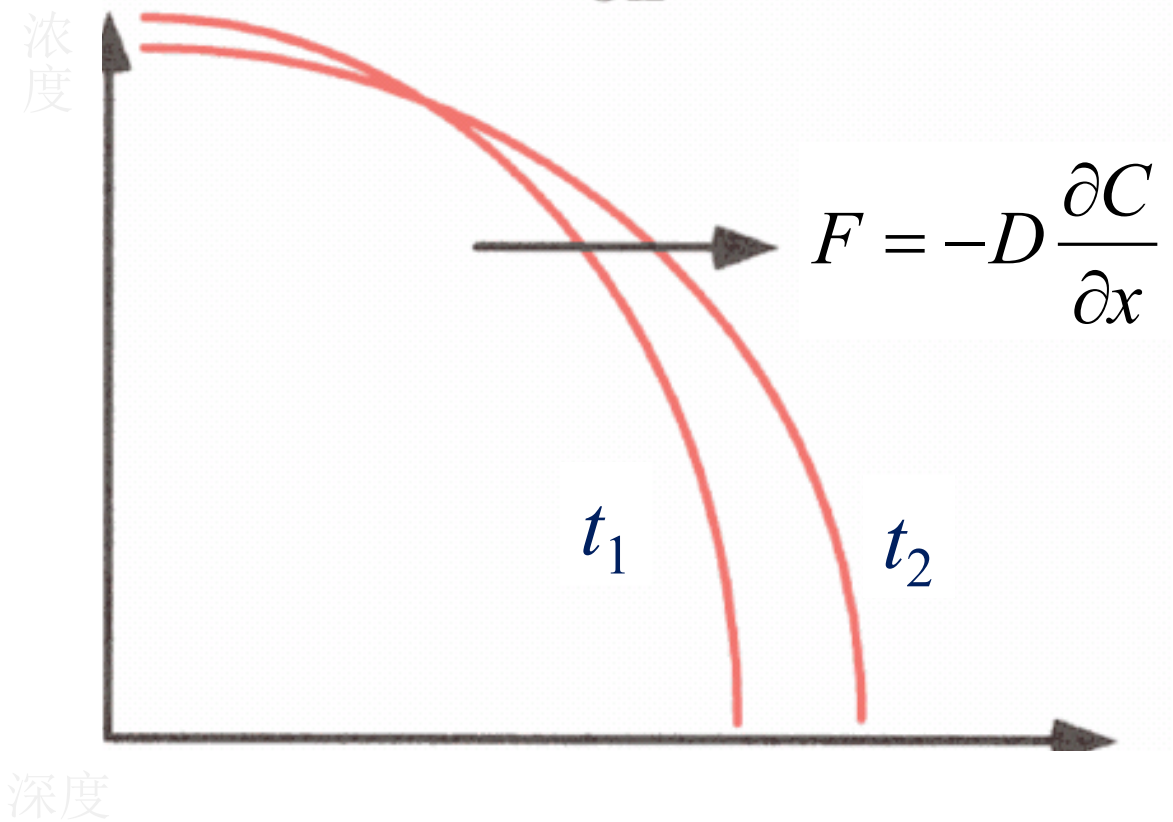
扩散是微观粒子作无规则热运动的统计结果，这种运动总是由粒子浓度较高的地方向浓度低的地方进行，而使得粒子的分布逐渐趋于均匀。扩散的原始驱动力是体系能量最小化。

扩散动力学

第五章 热扩散(上)

费克第一定律

$$F(x, t) = -D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x}$$



C 为杂质浓度 (number/cm³), D 为扩散系数 (cm²/s)。

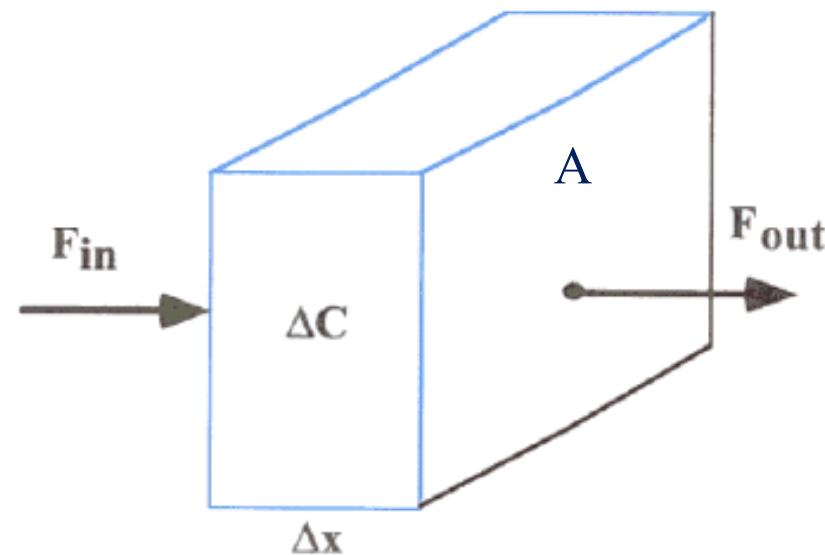
式中负号表示扩散是由高浓度处向低浓度处进行的,逆着浓度梯度方向
(浓度有着负斜率, 扩散朝着x的正向进行)

第五章 热扩散(上)

费克第二定律

—浓度、时间、空间的关系

单位体积内杂质原子数的变化量等于流入和流出该体积元的流量差



Δt 时间内该小体积内的杂质数目变化为

$$[C(x, t + \Delta t) - C(x, t)] \cdot A \cdot \Delta x$$

这个过程中由于扩散进出该小体积的杂质原子数为

$$[F(x, t) - F(x + \Delta x, t)] \cdot A \cdot \Delta t = -[F(x + \Delta x, t) - F(x, t)] \cdot A \cdot \Delta t$$

$$\therefore [C(x, t + \Delta t) - C(x, t)] \cdot A \cdot \Delta x = -[F(x + \Delta x, t) - F(x, t)] \cdot A \cdot \Delta t$$

第五章 热扩散(上)

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial F(x,t)}{\partial x} \quad \text{由} \quad F(x,t) = -D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}$$

$$\therefore \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial F(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]$$

假定 D 为常数

费克第二定律

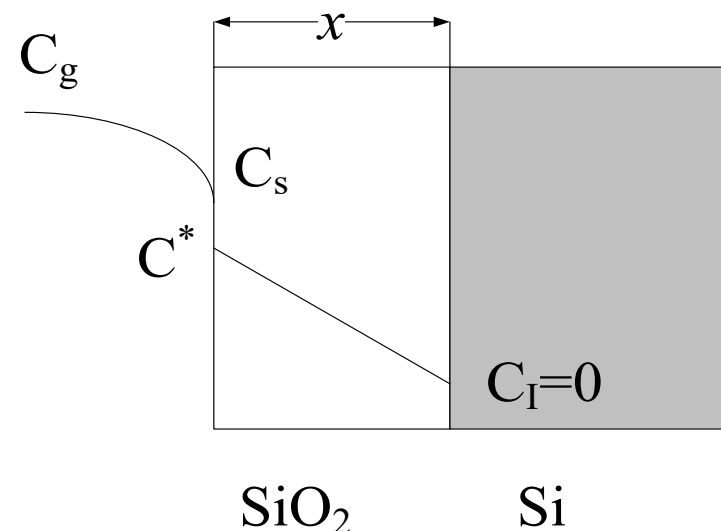
$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad \leftarrow \text{扩散方程}$$

特定边界条件下，扩散方程的解

1、稳态时，浓度不随时间变化

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \quad \text{有} \quad C = a + bx$$

如氧化剂在
 SiO_2 中的扩散



第五章 热扩散(上)

杂质的扩散掺杂：

扩散工艺是要将具有电活性的杂质，在一定**温度**，以一定**速率**扩散到衬底硅的特定位置，得到所需的掺杂浓度以及掺杂类型。

两种方式：**恒定表面源扩散和有限表面源扩散扩散工艺**

重要的工艺参数包括：① 杂质的分布 ② 表面浓度 ③ 结深 ④ 掺入杂质总量

2、恒定表面源扩散：表面杂质浓度恒定为 C_s

实际工艺中，这种工艺称作“预淀积扩散”。即气相中有无限量的杂质存在，可以保证在扩散表面的杂质浓度恒定。

初始条件： $C(x,0)=0, x \neq 0$

边界条件： $C(0,t)=C_s$
 $C(\infty,t)=0$

解方程，得恒定扩散方程的表达式

$$C(x,t) = C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$C(x,t)$ 为某处 t 时的杂质浓度

C_s 为表面杂质浓度，取决于某种杂质在硅中的最大固溶度

erfc 称作“余误差函数”

恒定表面源扩散杂质浓度服从余误差分布

第五章 热扩散²⁵(上)

余误差函数性质：

$\text{erfc}(x) = \text{Complementary Error Function} = 1 - \text{erf}(x)$

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-u^2) du \quad \text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty \exp(-u^2) du$$

$$\begin{aligned} \text{erf}(0) &= 0 & \frac{d[\text{erf}(x)]}{dx} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) & \frac{d^2[\text{erf}(x)]}{dx^2} &= -\frac{4}{\sqrt{\pi}} x \exp(-x^2) \\ \text{erf}(\infty) &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{对于 } x \ll 1 \quad \text{erf}(x) &\approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} x \\ \text{对于 } x \gg 1 \quad \text{erf}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp(-x^2)}{x} \end{aligned} \quad \int_0^\infty \text{erfc}(x) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

第五章 热扩散²⁶(上)

1) 掺杂总量为

$$Q = \int_0^{\infty} C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) dx = \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \sqrt{Dt}$$

\sqrt{Dt} : 称为特征扩散长度

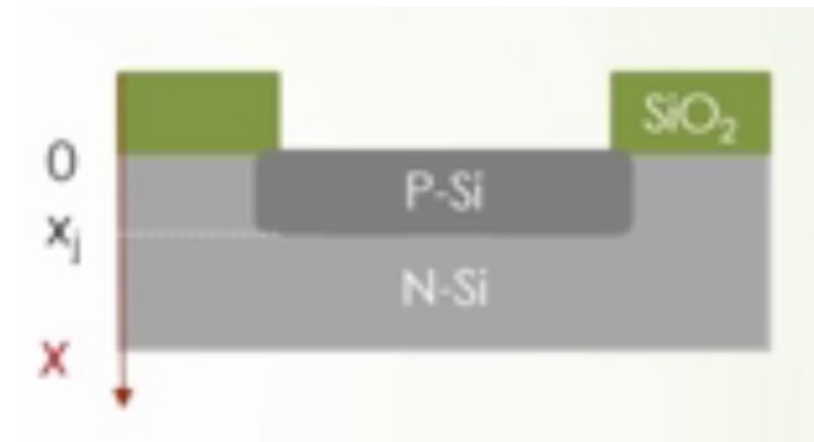
2) 扩散结深为 x_j , 则

$$C_B = C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x_j}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$$x_j = 2\sqrt{Dt} \operatorname{erfc}^{-1}\left(\frac{C_B}{C_s}\right) = A\sqrt{Dt}$$

A 和 C_s/C_B 有关

D 与温度 T 是指数关系, 因此
 T 对结深的影响要较 t 大许多



第五章 热扩散(上)

27

3) 杂质浓度梯度

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = -\frac{C_s}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

梯度受到 C_s 、 t 和 D （即 T ）的影响。改变其中的某个量，可以改变梯度。

在p-n结处

$$\left. \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right|_{x_j} = -\frac{2C_s}{\sqrt{\pi x_j}} \exp\left\{-\left[\operatorname{erfc}^{-1}\left(\frac{C_B}{C_s}\right)\right]^2\right\} \times \operatorname{erfc}^{-1}\left(\frac{C_B}{C_s}\right)$$

C_B 和 C_s 一定时， x_j 越深，结处的梯度越小。

第五章 热扩散²⁸(上)

3、有限源扩散：杂质总量恒定为 Q_T

在整个扩散过程中，沉淀积的扩散杂质总量作为扩散的杂质源，不再有新源补充。如先期的沉淀积扩散或者离子注入一定量的杂质，随后进行推进退火时发生的高温下扩散。

初始条件: $C(x,0) = C_s \quad x \leq h$

$$C(x,0) = 0 \quad x > h$$

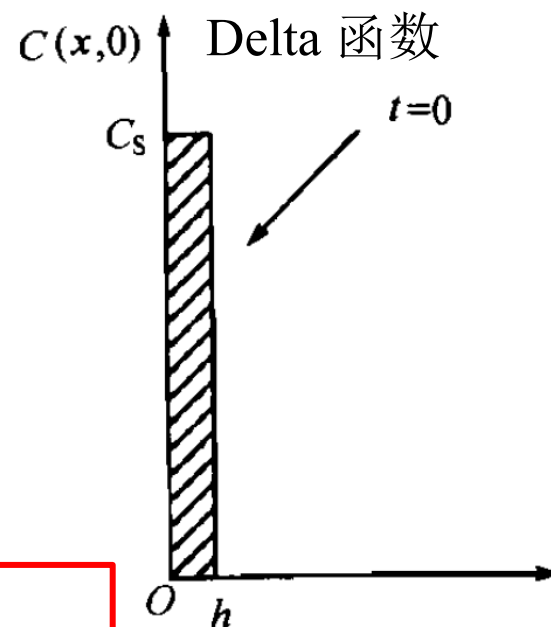
边界条件: $C(\infty, t) = 0$

$$\int_0^\infty C(x,t) dx = Q_T$$

得到高斯分布

$$C(x,t) = \frac{Q_T}{\sqrt{\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 D t}\right)$$

C_s \nearrow



有限源扩散杂质浓度服从高斯分布

第五章 热扩散²⁹(上)

1) 表面浓度 C_s 随时间而减少

$$C_s = C(0, t) = \frac{Q_T}{\sqrt{\pi D t}}$$

2) 扩散结深

$$x_j = 2\sqrt{Dt \ln\left(\frac{C_s}{C_B}\right)}$$
$$= 2\sqrt{Dt \ln\left(\frac{Q_T}{C_B \sqrt{\pi D t}}\right)} = A\sqrt{Dt}$$

A随时间变化

3) 浓度梯度

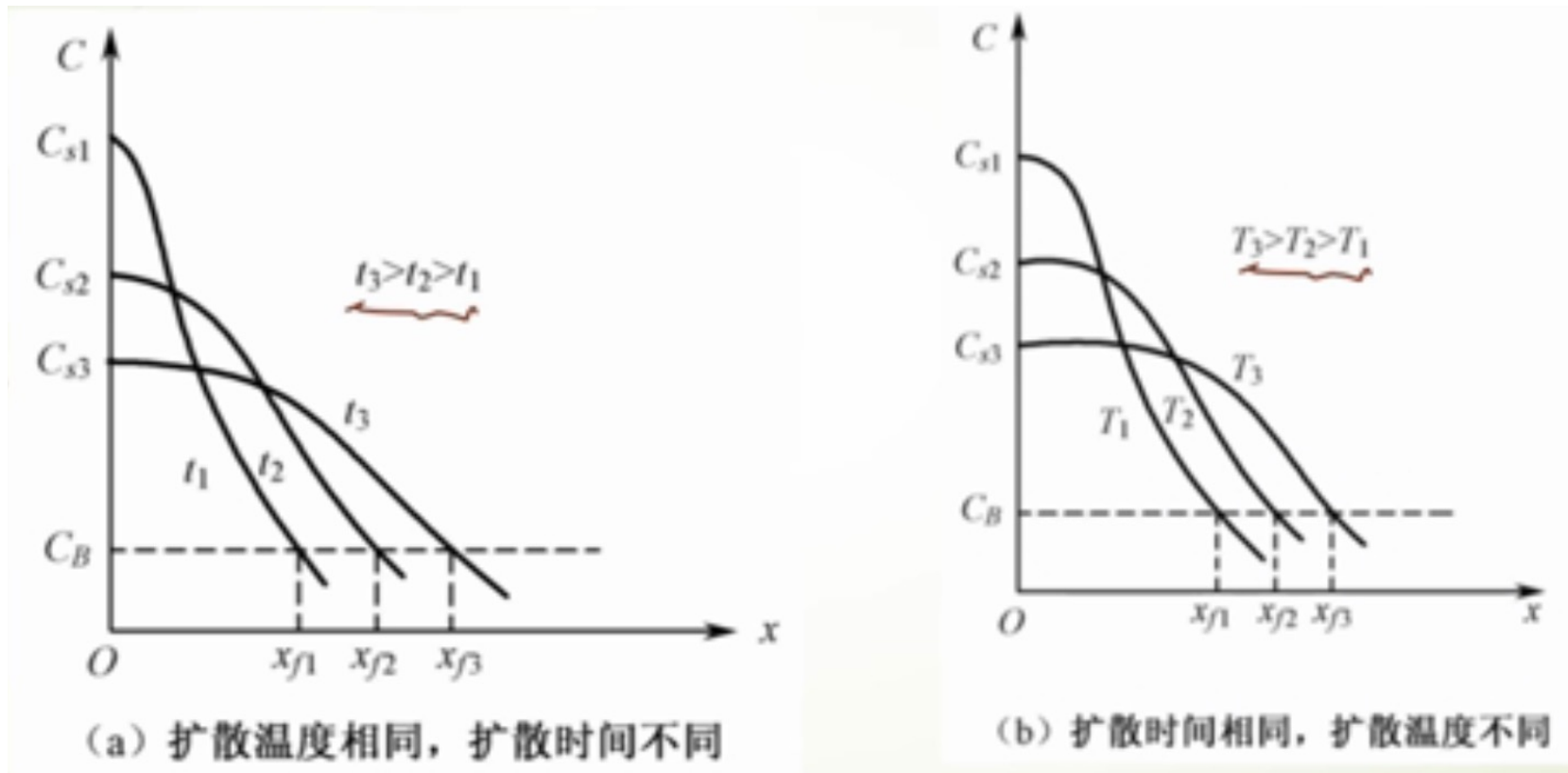
$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} = -\frac{x}{2Dt} C(x, t)$$

在p-n结处

$$\left. \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right|_{x_j} = -\frac{2C_B}{x_j} \ln\left(\frac{C_s}{C_B}\right)$$

浓度梯度随着扩散深度（结深）增加而下降

第五章 热扩散(上)



- ✓ 扩散时间越长，扩散越深，表面浓度越低。
- ✓ 扩散时间相同时，扩散温度越高，表面浓度下降越多。
- ✓ 用于制作低表面浓度的结和较深的p-n结。

多步退火（推进）过程（Multiple drive-in process）

- ✓ 当扩散系数相同时，

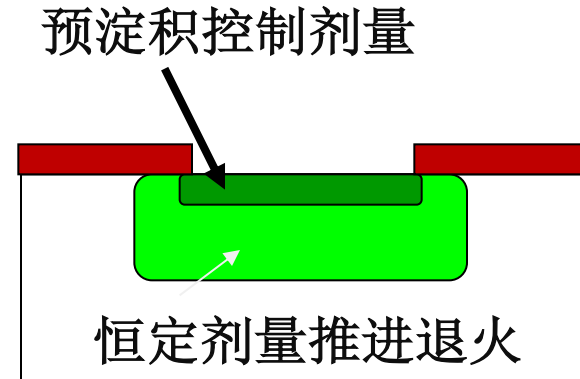
$$(Dt)_{eff} = D(t_1 + t_2 + \dots + t_n)$$

- ✓ 当扩散系数不同时，

$$(Dt)_{eff} = D_1 t_1 + D_2 t_2 + \dots = D_1 t_1 + D_1 t_2 \left(\frac{D_2}{D_1} \right) + \dots$$

- ✓ $(Dt)_{eff}$ 用来衡量扩散过程的热过程（thermal budget）

- ✓ 由于扩散系数成指数随温度增加，因此热过程主要由最高温度下的扩散来决定，别的一些步骤在决定扩散总量时可以忽略。

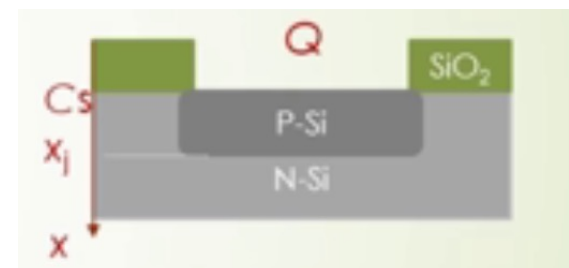
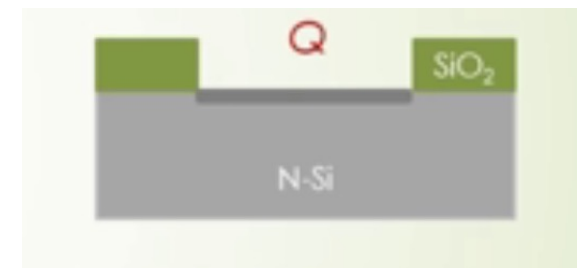


第一步 为恒定表面浓度的扩散（**Pre-deposition**）
（称为预沉积或预扩散）
控制掺入的杂质总量

$$Q = 2C_1\sqrt{\frac{D_1t_1}{\pi}}$$

第二步 为有限源的扩散（**Drive-in**），往往同时氧化
（称为主扩散或再分布）
控制扩散深度和表面浓度

$$C_2 = \frac{Q}{\sqrt{\pi D_2 t_2}} = \frac{2}{\pi} C_1 \sqrt{\frac{D_1 t_1}{D_2 t_2}}$$

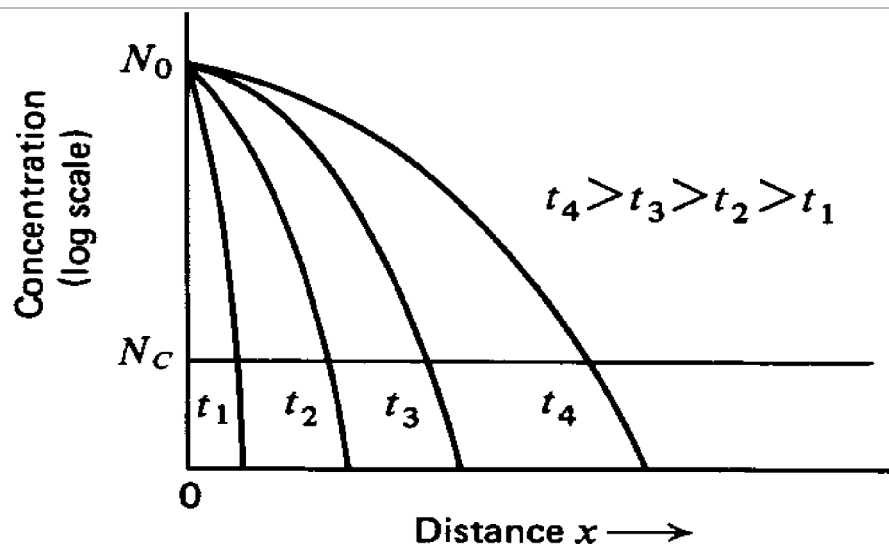


二步扩散的两种极端情况

$$\sqrt{D_1 t_1} > \sqrt{D_2 t_2} \quad \text{or} \quad \sqrt{D_1 t_1} < \sqrt{D_2 t_2}$$

两步工艺杂质浓度分布，两步扩散之后的杂质最终分布形式将由具体工艺条件决定，是两个扩散过程结果的累加。

- (1) 当扩散系数与时间乘积第一步大于第二步，预沉积起决定作用，杂质接近余误差函数分布
- (2) 当扩散系数与时间乘积第一步小于第二步，主扩散起决定作用，杂质接近高斯函数分布

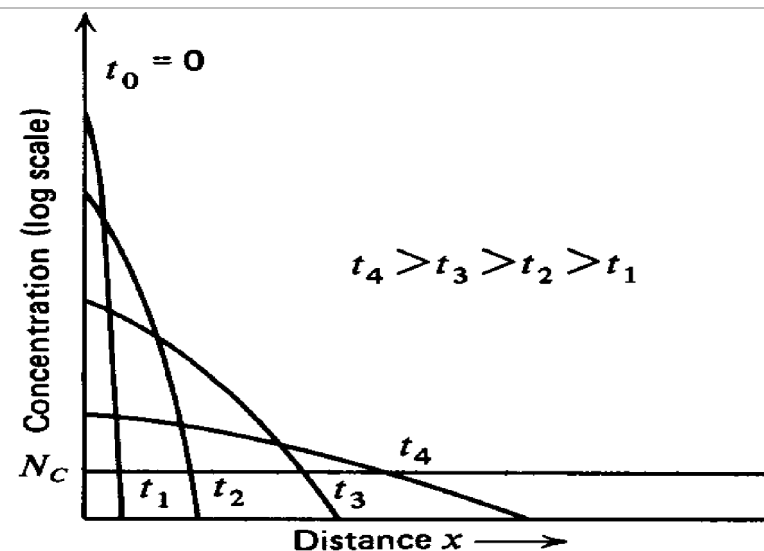


余误差函数分布 (erfc)

表面浓度恒定

杂质总量增加

扩散深度增加



高斯函数分布 (Gaussian)

表面浓度下降

杂质总量恒定

结深增加

关键参数

C_s (表面浓度)

x_j (结深)

本节课主要内容

1、掺杂工艺一般分为哪两步？结深？薄层电阻？固溶度？

预淀积+退火。预淀积：气固相预淀积扩散或离子注入。 R_s ：表面为正方形的半导体薄层，在电流方向所呈现的电阻。单位为 Ω/\square 。反映扩散入硅内部的净杂质总量。固溶度：在平衡条件下，杂质能溶解在硅中而不发生反应形成分凝相的最大浓度。

2、两种特殊条件下的费克第二定律的解及其特点？特征扩散长度？

$$\sqrt{Dt}$$

$$C(x, t) = C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

表面浓度恒定，余误差函数分布(erfc)。随时间变化：杂质总量增加，扩散深度增加

$$C(x, t) = \frac{Q_T}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

杂质总量恒定，高斯函数/正态分布(Gaussian)。随时间变化：表面浓度下降，结深增加